



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Institut National Polytechnique de Toulouse
Spécialité : Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par Angélique Ponçot
Le 3 octobre 2008

Titre : Assimilation de données pour la dynamique du xénon
dans les cœurs de centrale nucléaire

JURY

M. Éric Blayo	Président
M. Gérald Desroziers	Rapporteur
M. Patrick Erhard	Examineur
M. Serge Gratton	Examineur
M. Nordine Kerkar	Examineur
M. Richard Sanchez	Rapporteur
M. Olivier Thual	Directeur

École doctorale : Mécanique, Énergétique, Génie civil, Procédés
Unité de recherche : CERFACS
Directeur de Thèse : Olivier Thual

Mis en page avec la classe thloria.

Remerciements

Je tiens tout d’abord à remercier les membres de mon jury : un grand merci à G rald Desroziers et Richard Sanchez pour avoir bien voulu  tre rapporteurs de cette th se pluridisciplinaire et pour l’int r t qu’ils ont port    mon travail compte tenu de leur domaine respectif. Un grand merci  galement   ric Blayo pour avoir accept   pr sider le jury. Je remercie Nordine Kerkar de m’avoir fait d couvrir la neutronique. Sa pr sence dans le jury me fait le plus grand plaisir.

Je souhaite remercier vivement les personnes qui ont encadr   cette th se en particulier pour la disponibilit   dont ils ont fait preuve    chaque fois que j’en avais besoin. Je remercie mon directeur de th se, Olivier Thual, pour son enthousiasme, ses id  es et son optimisme tout au long de cette th se, m  me pendant les moments les plus difficiles. Je remercie mon autre co-encadrant “acad  mique”, Serge Gratton, pour ses conseils avis  s et nos nombreuses (et tr  s longues) discussions scientifiques au t  l  phone. Enfin je remercie mon encadrant c  t   EDF, Patrick Erhard, pour m’avoir propos   cette th se et pour n’avoir jamais   t      court d’id  es, de pistes    explorer.

Au cours de cette th se, j’ai b  n  fici   de l’appui des membres du projet ADONIS. Je remercie donc Bertrand Bouriquet, Guillaume Gacon (parti    pr  sent vers d’autres horizons mais dont l’aide m’a   t   indispensable), S  bastien Massart et Sophie Ricci. Je voudrais r  server une attention particuli  re    Jean-Philippe Argaud    qui j’adresse toute ma reconnaissance pour le temps qu’il a consacr      la relecture de cette th se et pour ses nombreux encouragements et pr  cieux conseils.

J’ai   galement pu profiter de l’aide de beaucoup de mes coll  gues neutroniciens    EDF. Je leur suis reconnaissante pour leur disponibilit   et leurs encouragements. Je remercie plus particuli  rement Serge Marguet, David Lecarpentier et J  r  me Texeraud pour toutes les discussions techniques que nous avons pu avoir ensemble sur la mod  lisation des c  urs. Mes remerciements vont   galement    Michel Tommy-Martin et Michel Lam-Hime dont j’ai pu profiter de l’expertise en mati  re d’exploitation des REP.

Je tiens par ailleurs    remercier Jean-Louis Vaudescal, Fran  oise Waeckel,   ric Lorentz et Olivier Dubois pour m’avoir permis de r  aliser cette th se sur une partie de mon temps de travail ing  nieur    EDF.

Je tiens aussi    remercier mes coll  gues toulousains du CERFACS qui m’ont accueilli au sein de leur   quipe, ainsi que le service informatique du CERFACS dont l’aide, tr  s comp  tente, n’a jamais fait d  faut au cours de mes nombreux d  placements.

Je voudrais    pr  sent remercier tous ceux qui, jour apr  s jour, m’ont aid      mener    bien cette th se. J’adresse toute ma gratitude    Bruno, Sa  id, Laurent et Nadia qui m’ont encourag  e tr  s fortement    me lancer dans cette exp  rience. Je suis   galement redevable de beaucoup de choses vis-  -vis d’autres coll  gues : merci Dominique et Pascale pour votre relecture minutieuse

du manuscrit, merci Ivan et Éric pour avoir répondu à mes “SOS informatique”, merci Antoine pour m’avoir parlé d’autre chose que de la thèse, merci Frank pour ton anglais impeccable. Merci à tous pour votre soutien et vos encouragements.

Je n’oublie pas mes amis qui m’ont écoutée et soutenue pendant ces quatre années : un grand merci à Stefan, aux Fred’s, à David et Nath pour leur bonne humeur (malgré ma mauvaise humeur parfois), merci à Pierre et Anne pour avoir partagé avec moi leur expérience de la thèse. Enfin merci à tous ceux que j’ai croisé un peu, beaucoup et qui m’ont à chaque fois encouragée d’un petit mot.

Mes dernières pensées vont à ma famille, qui a toujours eu confiance dans ce que j’entreprenais et m’a toujours laissée libre de mes choix ainsi qu’à Stéphane que je ne remercierai jamais assez pour son soutien indéfectible et inestimable. Cette thèse leur est dédiée.

Table des matières

Introduction générale	1
-----------------------	---

Partie I Présentation du contexte physique et mathématique

1	Modélisation des cœurs des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP)	7
1.1	Description générale des REP	9
1.1.1	Fonctionnement des REP	9
1.1.2	Description du cœur	11
1.1.3	Mécanismes de contrôle de la réactivité	14
1.1.4	Conduite du réacteur	16
1.1.5	Instrumentation des REP	17
1.2	Bases de physique neutronique	19
1.2.1	Éléments de physique nucléaire	19
1.2.2	Introduction à la neutronique	20
1.3	Effets du xénon 135	23
1.3.1	Dynamique du xénon 135	23
1.3.2	Propriétés de la dynamique couplée	25
1.3.3	Panorama des travaux concernant l'étude des effets xénon dans les réacteurs	28

2	Introduction à l'assimilation de données	31
2.1	Bases de l'assimilation de données	33
2.1.1	Principe	33
2.1.2	Notations et définitions	33
2.1.3	Description des erreurs	35
2.1.4	Critère d'optimalité	36
2.2	La théorie de l'estimation	37
2.2.1	Approche bayésienne	37
2.2.2	Interpolation statistique	38
2.3	Filtre de Kalman	40
2.3.1	Principe	40
2.3.2	Propriétés du filtre de Kalman	41
2.3.3	Obtention du filtre de Kalman par l'approche bayésienne	42
2.3.4	Déclinaisons du filtre de Kalman	43
2.4	Méthodes variationnelles	45
2.4.1	Méthode 3DVAR	45
2.4.2	Méthode 4DVAR	46
2.4.3	Qualités de l'analyse	47
2.4.4	Méthodes variationnelles avancées	48
2.4.5	Qualités et défauts de l'approche variationnelle	49
2.5	Comparaison du filtre de Kalman et des méthodes variationnelles	49
2.5.1	Caractéristiques du filtre de Kalman et du 4DVAR	49
2.5.2	Équivalence entre le filtre de Kalman et le 4DVAR	50
2.5.3	Performances	50
2.5.4	Synthèse	51
2.6	Mise en œuvre des méthodes d'assimilation de données	51
2.6.1	Modélisation des matrices de covariance d'erreur	51
2.6.2	Méthode de l'adjoint pour l'assimilation variationnelle	52

Partie II Construction d'un système d'assimilation pour la dynamique xénon

3	CIREP1D, code 1D pour les REP	61
3.1	Description	62

3.1.1	Principe	62
3.1.2	Modélisation physique	63
3.1.3	Calcul d'un régime permanent	76
3.1.4	Calcul d'un transitoire xénon	78
3.2	Validation	79
3.2.1	Présentation succincte de COCCINELLE	80
3.2.2	Calculs en régime permanent	81
3.2.3	Calcul de dynamique xénon	84
3.3	Modèles tangent et adjoint de CIREP1D	86
3.3.1	Différentiation du modèle direct	87
3.3.2	Validation des codes produits	87
3.3.3	Performances des codes tangent et adjoint	88
3.3.4	Retour d'expérience sur la différentiation automatique	88
3.4	Trois simulations de transitoires xénon	90
3.4.1	Dynamique convergente (simulation A)	90
3.4.2	Dynamique divergente (simulation B)	91
3.4.3	Pic xénon (simulation C)	91
4	Description du schéma d'assimilation 4DVAR	97
4.1	Chaîne d'assimilation	98
4.1.1	Précision des notations	98
4.1.2	Espace de contrôle	99
4.1.3	Espace d'observation	101
4.2	Modélisation des matrices de covariance d'erreur	102
4.2.1	Modélisation des matrices de covariance \mathbf{R}_i	103
4.2.2	Modélisation univariée de la matrice de covariance \mathbf{B}	103
4.3	Mise en place du schéma	107
4.3.1	Expériences jumelles	107
4.3.2	Implémentation dans PALM	108
4.3.3	Premières expériences d'assimilation	110
5	Minimisation de la fonction coût du 4DVAR	115
5.1	Propriétés numériques du système variationnel	116
5.1.1	Étude de la non-linéarité du modèle et de la fonction coût	117
5.1.2	Conditionnement et préconditionnement	120
5.2	Étude du comportement général de la minimisation	125
5.3	Comparaison de méthodes de minimisation non linéaire	125

5.3.1	Généralités	126
5.3.2	Méthode de gradient non linéaire	128
5.3.3	Méthode de quasi-Newton (LBFGS)	132
5.3.4	Méthodes de type Gauss-Newton	135
5.3.5	Synthèse des résultats	140

Partie III Expériences d’assimilation de données pour la simulation des cœurs

6	Expériences simples d’assimilation de données	145
6.1	Études préliminaires	146
6.1.1	Comportement du cœur en fonction de son irradiation	146
6.1.2	Caractéristiques temporelles de la dynamique xénon/iode	150
6.1.3	Présentation du cadre des expériences et notations utilisées	153
6.2	Nature et rôle des observations	154
6.2.1	Assimilation d’un profil 1D de puissance	154
6.2.2	Prise en compte de mesures de la concentration en bore	157
6.2.3	Prise en compte de la donnée de l’axial offset de puissance	158
6.2.4	Observations et erreurs de mesure	158
6.3	Forme et influence du terme d’ébauche	162
6.3.1	Rôle de l’ébauche	162
6.3.2	Mise en place des corrélations spatiales dans \mathbf{B}	162
6.4	Poids de l’ébauche, poids des observations	165
6.5	Synthèse	168
7	Estimation des concentrations initiales dans le cadre de la perte du KIT	171
7.1	Énoncé du problème	172
7.1.1	Contexte	172
7.1.2	Dispositif expérimental	173
7.1.3	Rappel du schéma d’assimilation	177
7.2	Contrôle du xénon	178

7.2.1	Assimilation d'un unique ensemble d'observation au temps initial (schéma 3DVAR)	178
7.2.2	Prise en compte de la dynamique (schéma 4DVAR)	181
7.3	Contrôle du xénon et de l'iode en expérience 4DVAR	185
7.4	Et si la qualité de l'ébauche baissait ?	188
7.5	Synthèse	191
8	Vers la mise en place d'un outil de recalage en ligne	193
8.1	Énoncé du problème	194
8.2	Étude de schémas d'assimilation sur 24 heures	196
8.2.1	Caractéristiques de la chaîne d'assimilation	196
8.2.2	Expériences enchaînées sur 24 heures	200
8.3	Réduction du coût de l'assimilation par la réduction de l'espace de contrôle .	206
8.3.1	Formulation du problème variationnel	206
8.3.2	Comparaison des analyses par rapport à un schéma "complet"	207
8.3.3	Résultats préliminaires d'une chaîne d'assimilation 3DVAR sur 24 heures	208
8.4	Synthèse	212
	Conclusion générale	213
	<hr/>	
	Annexes	219
	A Un modèle point pour la modélisation des oscillations xénon	219
A.1	Introduction	219
A.2	Modèle 1D flux/xénon/iode	219
A.3	Modèle point des déséquilibres axiaux	220
A.4	Exemple	226
	B Valeurs numériques des différentes constantes physiques employées dans CIREP1D	229
	C Exemple de différentiation avec TAPENADE	231
	<hr/>	
	Liste des tableaux	235
	Liste des figures	237
	Glossaire de Neutronique	247

Glossaire d'Assimilation de Données	249
Bibliographie	251

Introduction générale

Essor des méthodes d'assimilation de données dans les sciences de la terre

Les méthodes d'assimilation de données sont associées à la prévision météorologique mais elles trouvent leurs racines dans le domaine de l'astronomie. Au 18ème siècle, les astronomes mettent au point des méthodes d'ajustement de paramètres pour l'estimation des orbites planétaires à partir de mesures réalisées avec divers instruments. La paternité de la méthode des moindres carrés issue de ces travaux est disputée par Gauss, Legendre et Laplace. L'originalité des travaux de Gauss est de chercher à montrer l'optimalité de l'estimateur de la méthode des moindres carrés. Le prolongement de ce résultat, connu à présent sous le nom du théorème de Gauss-Markov, est à la base de la théorie de l'estimation. Il établit que l'estimateur des moindres carrés est le meilleur estimateur linéaire sans biais (Best Linear Unbiased Estimator ou BLUE en anglais) d'un système linéaire dans lequel les erreurs ont une espérance nulle, sont non corrélées et dont les variances sont égales. Cet estimateur reste très populaire en raison de sa facilité d'implémentation et de son faible coût.

Différents domaines d'application se sont développés à partir de la théorie de l'estimation, comme par exemple le traitement du signal ou la théorie du contrôle. L'algorithme le plus populaire issu de la théorie du contrôle est le filtre de Kalman développé en 1960 pour résoudre des problèmes d'estimation de trajectoire pour le programme spatial APOLLO. La première application du filtre de Kalman à la météorologie revient à Jones en 1965. Parallèlement, Sasaki proposa une approche variationnelle de l'estimation pour la prévision des trajectoires des ouragans (1958). Jawinski mit ensuite en évidence l'équivalence entre ces deux approches (1970).

Le premier schéma 3DVAR opérationnel est lancé en 1991 au NMC (National Meteorological Center, États-Unis) puis en 1997 à Météo-France. C'est en 2000 que Météo-France met en œuvre un schéma 4DVAR dans sa chaîne de prévision météorologique. Ces techniques d'assimilation sont utilisées depuis plus d'une décennie dans les chaînes de calcul en production et sont à l'origine de la majeure partie des gains obtenus sur la qualité des prévisions météorologiques. Le coût de ces méthodes (en temps calcul et place mémoire) reste malgré tout un handicap et constitue une voie de progrès.

Les mesures en cœur du parc de centrales d'EDF et leur utilisation actuelle

Les trois vagues successives de construction des centrales nucléaires françaises, toutes issues de la filière REP (Réacteur à Eau Pressurisée), ont permis de constituer un parc nucléaire homogène : on distingue seulement trois catégories de réacteurs appelées "paliers", qui correspondent à la puissance électrique produite. Cette standardisation complétée par une gestion centralisée

du parc a favorisé la constitution d'un retour d'expérience (REX) basé sur un précieux enregistrement des mesures relevées dans les réacteurs en fonctionnement.

Certaines mesures délivrées en continu sont destinées à la surveillance du cœur. Elles visent à suivre de manière régulière l'évolution du cœur et à s'assurer que les critères de sûreté (comme le déséquilibre axial de puissance) sont respectés. Les mesures non issues de l'instrumentation de sécurité peuvent être réutilisées *a posteriori* pour une réanalyse de l'état du cœur. L'estimation de l'irradiation des assemblages, utile pour une meilleure gestion du combustible, est ainsi obtenue à partir de mesures de la distribution de la puissance dans le cœur.

Les mesures en cœur servent, d'autre part, à la qualification des nouveaux codes de neutronique, c'est-à-dire à l'estimation et à l'amélioration de la qualité de la simulation numérique par rapport à la réalité à travers la définition de marges d'erreur et le recalage des codes.

Percée de l'assimilation de données en neutronique

La qualification des codes de neutronique correspond actuellement à un problème d'estimation de paramètres, ceux-ci ayant été identifiés une fois pour toutes. Le remplacement de la plateforme de simulation neutronique à EDF, remet cependant en cause la procédure actuelle d'ajustement, peu flexible et coûteuse en temps de travail. De l'idée d'utiliser les techniques d'assimilation de données pour systématiser la démarche de qualification est né en 2004 le projet ADONIS (pour Assimilation de DONnées NeutronIquesS). Mais la plus-value de l'assimilation de données ne se limite pas à la mise en place d'une procédure plus générique de recalage de paramètres. Ce projet avait donc également pour mission d'identifier les applications de neutronique pour lesquelles les techniques d'assimilation pouvaient apporter un gain. Deux outils ont été développés dans le cadre de ce projet [Mas07]. Le premier concerne l'interpolation des champs 3D neutroniques (activités, puissances...) en utilisant de manière optimale les calculs numériques (ébauche) et l'ensemble des mesures disponibles (CFM, collectrons, thermocouples, chambres externes) [Erh05]. Le second s'intéresse à la procédure de qualification [Erh06]. Ces deux outils ont montré que les méthodes d'assimilation de données permettent d'obtenir de meilleurs résultats que les techniques utilisées jusqu'à présent, tant du point de vue de la qualité (en tenant compte notamment de l'erreur de mesure) que du point de vue de la rapidité de calcul. Ces deux outils n'intègrent cependant pas de modèle de dynamique du cœur mais seulement un modèle stationnaire.

Présentation de la thèse

Cette thèse s'inscrit dans la continuité des travaux d'ADONIS en s'intéressant aux aspects dynamiques de la simulation des cœurs et plus particulièrement à la problématique du pilotage du cœur sur plusieurs heures. À cette échelle de temps prédomine la dynamique du xénon dont les variations peuvent nécessiter la mise en place d'actions appropriées.

La fission de l'uranium 235 conduit à la création de nouveaux noyaux, appelés produits de fission. Ces produits de fission ont la propriété d'absorber les neutrons mais la plupart ont des sections d'absorption suffisamment petites pour qu'ils puissent être négligés dans le bilan total. Un des produits de fission qu'il ne faut cependant pas négliger dans le bilan neutronique est le xénon 135. Le xénon 135 est un gaz qui apparaît essentiellement par désintégration beta moins d'un autre produit de fission, l'iode 135, lui-même gazeux aux températures régnant dans le cœur. Sa dynamique est donc étroitement liée à celle de l'iode 135. Le xénon 135 est le noyau présentant pour les neutrons thermiques, la plus grande section d'absorption connue : elle est

environ 4000 fois plus grande que celle de l'uranium 235. Comme, de plus, son rendement est relativement élevé (environ 6.4% des fissions conduisent à la création d'un noyau de xénon 135), le xénon 135 est le premier contributeur à l'empoisonnement dans les REP.

Le xénon 135 est également connu pour être à l'origine, dans les cœurs de grande dimension axiale (cas des REP), d'oscillations axiales de puissance. Lors des transitoires de puissance, des grappes de commande sont insérées partiellement dans le cœur et conduisent à une diminution du flux neutronique dans la moitié haute du cœur. La diminution du flux entraîne quasi-immédiatement (quelques secondes) une diminution de la production d'iode ainsi qu'une diminution de la disparition du xénon par capture neutronique. L'iode continue néanmoins à se désintégrer en xénon. On assiste donc, pendant ce temps, à une augmentation du xénon. Cette augmentation entraîne une hausse des absorptions de neutrons et donc à une accélération de la diminution du flux et de la production d'iode. Ce phénomène d'augmentation de la concentration de xénon dans la partie haute du cœur s'inverse lorsque la concentration d'iode est quasi nulle. Il y a alors une diminution de la concentration xénon ce qui entraîne une diminution des absorptions de neutrons et donc une remontée du flux dans la partie haute du cœur. Cette remontée du flux conduit à nouveau à la production d'iode qui va pouvoir de nouveau alimenter le réservoir de xénon. La baisse de flux se réamorce lorsque la production de xénon est supérieure à sa disparition. Ces variations du niveau de flux dans les moitiés inférieure et supérieure du cœur entraînent des oscillations axiales de puissance. Ces oscillations sont invisibles au niveau de la puissance totale mais elles sont indésirables pour la bonne tenue du matériel. Elles ont cependant une période suffisamment longue (plusieurs heures) pour laisser le temps à l'opérateur de les amortir avec les moyens dont il dispose (déplacement des grappes de commande par exemple).

La détection et la prévision des oscillations axiales de xénon est un enjeu important pour l'optimisation du pilotage du réacteur. L'objectif de cette thèse est de proposer divers schémas d'assimilation de données pour améliorer la simulation de la dynamique xénon et donc la prévision des oscillations axiales de xénon. Il s'agit notamment d'identifier les variables que l'on veut contrôler ainsi que les mesures que l'on peut utiliser, de spécifier les statistiques d'erreurs associées et de déterminer la méthode d'assimilation la plus appropriée au cas traité. Il s'agit d'autre part de pointer les difficultés éventuelles à dépasser pour une mise en opérationnel du schéma d'assimilation.

Plan du mémoire de thèse

La première partie du mémoire a pour objectif de présenter le contexte général de cette thèse. Le chapitre 1 propose une description générale des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) depuis leur fonctionnement jusqu'aux questions de pilotage en passant par la présentation de leur instrumentation. Ce chapitre contient également des bases de physique neutronique nécessaires à la compréhension de ce mémoire et se conclut par la présentation des effets xénon dans les REP. On introduit dans le chapitre 2 les concepts de base de l'assimilation puis on présente et compare les différentes méthodes phares de l'assimilation. Ce chapitre aborde également les questions pratiques de mise en œuvre de ces méthodes : modélisation des matrices d'erreur, obtention de l'adjoint.

La deuxième partie est consacrée à la mise en place d'un schéma d'assimilation variationnel 4DVAR. On décrit dans le chapitre 3 le modèle 1D de dynamique xénon développé dans le cadre de cette thèse. On y détaille également l'obtention du modèle adjoint par différentiation automatique. Le chapitre 4 précise les différents choix techniques opérés : composition du vecteur

d'état et du vecteur d'observation, spécification des matrices de covariance d'erreur et implémentation informatique de la chaîne. Le chapitre 5 est dédié à la minimisation de la fonction coût du 4DVAR.

La troisième et dernière partie de cette thèse propose un ensemble d'expériences d'assimilation visant à évaluer l'apport des méthodes d'assimilation pour la simulation de la dynamique xénon. On étudie dans le chapitre 6 quelques expériences "simples" d'assimilation dans le but de mieux appréhender le processus d'analyse en fonction des différents ingrédients qui le composent. Les deux chapitres qui suivent présentent deux cas concrets d'application. Le chapitre 7 s'intéresse au recalage d'un outil d'aide au pilotage après une perte de ses données d'entrée. Le chapitre 8 étudie la mise en place d'un outil de recalage en ligne de l'état de la dynamique du cœur.

On trouvera en conclusion une synthèse des différents travaux menés et des apports de cette thèse. Enfin diverses perspectives de recherche ouvertes par ce travail sont exposées.

Puisque cette thèse aborde deux thématiques distinctes, l'assimilation de données et la physique des cœurs, on fournit en annexe un glossaire de neutronique ainsi qu'un glossaire d'assimilation de données afin de faciliter la lecture de ce mémoire.

Première partie

Présentation du contexte physique et mathématique

Modélisation des cœurs des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP)

Trois types de centrale ont été construits en France : la filière “graphite gaz” (UNGG) développée conjointement par le CEA et EDF, la filière à “eau pressurisée” (REP) de technologie américaine (Westinghouse) et la filière plus récente des réacteurs à neutrons rapides (le réacteur expérimental Phénix toujours en fonctionnement et Superphénix arrêté en 1998). La filière UNGG fut abandonnée en 1969 au profit de la filière REP jugée plus prometteuse sur le plan économique. Au niveau mondial, la filière REP compte aujourd’hui plus de réacteurs en fonctionnement que les autres filières réunies. Les caractéristiques essentielles du REP reposent sur plusieurs choix de conception : l’utilisation d’eau ordinaire comme ralentisseur de neutrons et comme fluide caloporteur, l’arrêt du réacteur pour le chargement et déchargement du combustible et la production de vapeur dans des générateurs de vapeur.

Actuellement le parc français de production nucléaire est constitué de 58 réacteurs tous de type REP répartis sur 19 sites. Ces réacteurs d’une puissance électrique de 900 MWe, 1300 MWe ou 1450 MWe (les plus récents) constituent donc un parc relativement homogène facilitant l’exploitation et la constitution du retour d’expérience d’exploitation.

La production d’électricité au sein d’une centrale nucléaire suit le même schéma que dans une centrale thermique classique : l’énergie électrique est produite par un alternateur couplé à une turbine alimentée par de la vapeur d’eau. L’énergie permettant d’obtenir cette vapeur d’eau provient de fissions nucléaires dans le cas de la centrale nucléaire ou de la combustion du charbon dans le cas des centrales thermiques classiques. C’est par analogie à la centrale à charbon qu’on parle de “combustible” pour désigner la matière subissant les réactions nucléaires mises en jeu dans le réacteur nucléaire. Les fissions nucléaires participent à une réaction en chaîne : les neutrons libérés par la fission des noyaux du combustible peuvent à leur tour provoquer des fissions. Afin d’ajuster le niveau de puissance délivré par la centrale, il est nécessaire de contrôler cette réaction en chaîne. Deux moyens de contrôle sont à la disposition de l’opérateur : des grappes de commande et du bore. Les grappes de commande sont composées d’absorbants solides de neutrons qu’on introduit plus ou moins profondément dans le cœur. Le bore est un poison neutronique qu’on dilue dans le fluide circulant dans le cœur. La stratégie d’utilisation des grappes de commande et du bore définit le mode de pilotage de la centrale. Le pilotage du réacteur s’appuie sur des indicateurs de l’état du cœur fournis par différents capteurs mesurant en continu ou non diverses grandeurs physiques. Ces différents éléments de description générale des REP sont développés dans la section [1.1](#).

La section 1.2 de ce chapitre introductif fournit les éléments de physique neutronique nécessaires à la compréhension de la dynamique du xénon et de ses effets. On rappelle tout d'abord la définition de termes usuels de la physique nucléaire, puis on propose une courte introduction à la neutronique.

La dernière section de ce chapitre (section 1.3) est consacrée à la description de l'empoisonnement du cœur par le xénon 135, issu des fissions nucléaires. Le xénon 135 est à l'origine de pics "xénon" et d'oscillations axiales de puissance, induisant des contraintes de pilotage. On présente d'abord les équations de la dynamique du xénon, couplées à celle d'un autre produit de fission : l'iode 135. On décrit ensuite le phénomène de pic xénon ainsi que les raisons de l'apparition d'oscillations axiales de puissance. les oscillations axiales de la concentration xénon. La détection et la prévision des oscillations axiales de xénon est un enjeu important pour l'optimisation du pilotage du réacteur. On conclut cette section par un panorama des travaux réalisés à ce sujet.

1.1 Description générale des REP

Pour une introduction à l'énergie nucléaire et à la neutronique, on recommande les ouvrages de vulgarisation de P. Reuss dans la collection *Que sais-je ?* [Reu94][Reu98]. Pour une lecture plus approfondie des problématiques de la physique des cœurs, on conseille les ouvrages de référence en langue française, de J. Bussac et P. Reuss [Bus85], de R. Barjon [Bar93], et de P. Reuss [Reu03]. On signale que le livre de D. Rozon est entièrement dédié à la cinétique des réacteurs nucléaires [Roz92].

1.1.1 Fonctionnement des REP

Une centrale nucléaire regroupe l'ensemble des installations permettant de produire de l'électricité et peut comprendre plusieurs réacteurs, chacun correspondant à une "tranche" possédant ses propres bâtiments pour la production d'électricité. Les principales installations de la tranche sont (voir figure 1.1) :

- le bâtiment réacteur qui contient entre autres le réacteur, les générateurs de vapeur, le circuit primaire ;
- la salle des machines où se trouvent en particulier la turbine à vapeur et l'alternateur ;
- un dispositif de refroidissement qui peut être un aéroréfrigérant ou, lorsque la centrale est au bord de mer, une station de pompage de l'eau de mer.

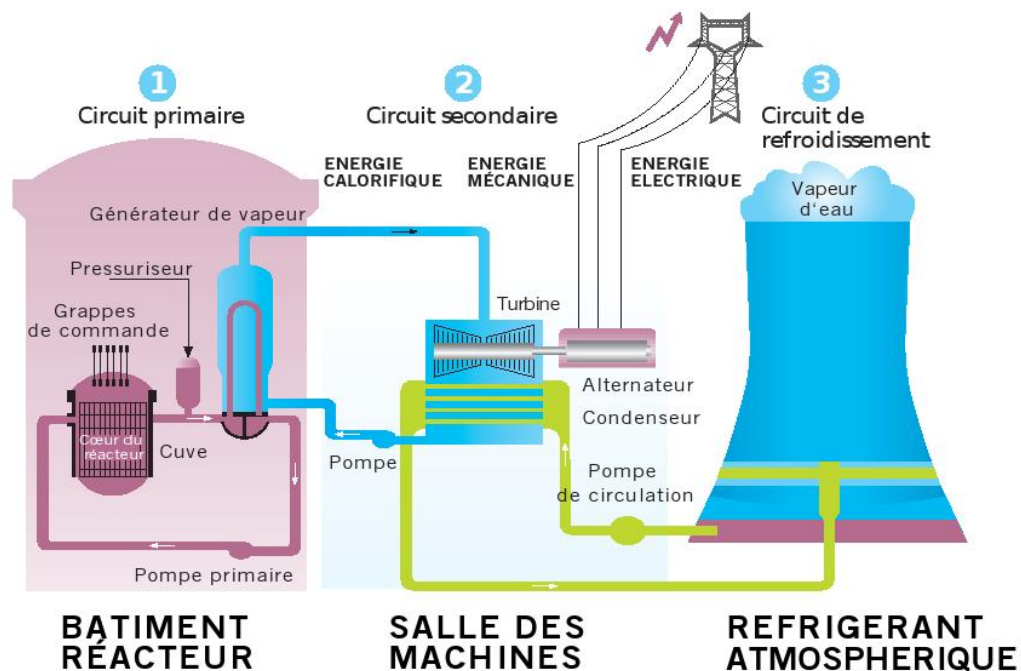


FIG. 1.1. Principe d'un Réacteur à Eau Pressurisée avec aéroréfrigérant.

Source : http://www.hellfirez.de/web/referate/inhalte/Physik_Energie.htm. Auteur : Steffen Kuntzoff, licence CC-BY.

On distingue deux grandes étapes dans la production d'électricité d'origine nucléaire :

1. la production d'énergie par les réactions de fission au sein du cœur,

2. la transformation de cette énergie nucléaire en énergie électrique, qui comporte elle-même plusieurs étapes.

Production d'énergie par fissions nucléaires

Le combustible contenu dans le cœur du réacteur est soumis à un bombardement de neutrons qui occasionne la fission de certains noyaux. Cette fission libère une grande quantité d'énergie ainsi que quelques neutrons (en moyenne 2.4 neutrons par fission) qui engendreront à leur tour des fissions : c'est le principe de la réaction en chaîne. Cette réaction en chaîne est caractérisée par le facteur de multiplication effectif k défini comme le rapport entre le nombre de neutrons produits et le nombre de neutrons consommés. Si on note N_0 le nombre initial de neutrons, ces derniers vont occasionner N_0 fissions qui libéreront kN_0 neutrons qui eux-mêmes conduiront à la production de k^2N_0 neutrons, etc (figure 1.2).

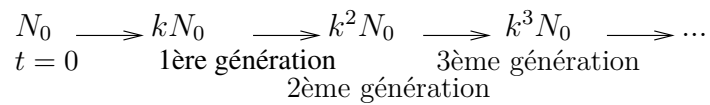


FIG. 1.2. Évolution d'une réaction en chaîne à partir d'un nombre N_0 de neutrons

Dans un réacteur on recherche une réaction en chaîne *équilibrée*, caractérisée par un facteur de multiplication est égal à 1 ; on dit dans ce cas que le réacteur est critique. Lorsque ce facteur est supérieur à 1, le réacteur est dit sur-critique : la réaction en chaîne s'emballe. Lorsqu'il est inférieur à 1, le réacteur est sous-critique et la réaction en chaîne s'éteint.

Les neutrons de la réaction en chaîne sont émis à différentes vitesses (ou énergies¹), selon le *spectre d'émission*. Leur énergie est un facteur important dans la probabilité de fission du noyau cible. On distingue souvent deux groupes de neutrons : les neutrons rapides et les neutrons lents. On utilise souvent l'adjectif "thermique" pour faire référence à ces derniers : neutrons thermiques, groupe thermique par exemple. Cette dénomination provient du fait que l'énergie des neutrons lents est du même ordre de grandeur que celle de l'agitation thermique du milieu environnant (vitesse de l'ordre de 2 à 3 km par seconde). On rencontre également l'expression *réacteur thermique* pour désigner un réacteur pour lequel le meilleur rendement de fission est obtenu avec des neutrons lents (cas du REP). Pour ce type de réacteur, on cherche alors à ralentir les neutrons dans le cœur à l'aide d'un élément modérateur. Dans le cas des REP, c'est l'eau du circuit primaire chargé d'emporter l'énergie thermique qui assure aussi cette fonction. L'eau ordinaire contient en effet de l'hydrogène qui, compte tenu de sa très faible masse, ralentit très bien les neutrons.

Transfert d'énergie dans les circuits primaire, secondaire et de refroidissement

Le transfert de chaleur est assuré dans les REP par trois circuits distincts qui permettent de prévenir le relâchement dans l'environnement de produits radioactifs provenant du cœur du réacteur. Le circuit primaire est le circuit en contact avec le cœur. Le fluide qu'il contient circule dans le cœur du bas vers le haut pour récupérer l'énergie dégagée par les fissions. L'élévation de température du fluide est d'une trentaine de degrés celsius : le fluide a une température en entrée du cœur d'environ 290 degrés Celsius et en sortie d'environ 320-330 degrés Celsius (les

¹On utilise indistinctement l'expression "vitesse des neutrons" ou "énergie des neutrons".

températures d'entrée et de sortie du cœur sont fixées par le modèle de réacteur). La traversée du cœur est extrêmement rapide : le fluide met environ 1 seconde pour parcourir les 4 mètres de hauteur du cœur. Dans le cas des REP, ce fluide est de l'eau ordinaire et joue donc le rôle de *caloporteur*.

Afin d'assurer le contrôle de la réaction nucléaire, on dilue de l'acide borique dans le circuit primaire. Le circuit primaire est maintenu sous pression, autour de 155 bars, pour éviter l'ébullition de l'eau. On a pour habitude d'appeler "branche froide" la partie amont du circuit primaire avant le cœur et "branche chaude" la partie aval.

La chaleur du circuit primaire est cédée au circuit secondaire. Ce transfert s'opère dans un générateur de vapeur (GV) par échange thermique entre les deux fluides : il n'y a pas d'échange de matière entre l'eau du circuit primaire et celle du circuit secondaire qui est alors à l'abri de toute contamination radioactive. L'eau du circuit primaire ayant perdu la trentaine de degrés gagnés dans le cœur est alors renvoyée vers la branche "froide".

L'eau du circuit secondaire étant à une pression plus faible que celle du primaire, elle se retrouve en sortie du GV sous forme vapeur. Cette vapeur est envoyée vers une turbine servant à l'alimentation d'un groupe turbo-alternateur produisant de l'électricité. Cette dernière transite ensuite sur les lignes à très haute tension à partir du transformateur.

A la sortie de la turbine, la vapeur repasse à l'état liquide à l'aide d'un troisième circuit : le circuit de refroidissement. L'eau du circuit de refroidissement provient de la mer ou d'un fleuve. Dans le second cas, l'eau est refroidie au contact de l'air dans un aéroréfrigérant avant d'être rejetée dans le fleuve.

On donne dans le tableau 1.1 quelques ordres de grandeur des installations pour les REP du parc EDF.

Modèle REP	900 MWe	1300 MWe	1450 MWe
Circuit primaire			
Pression (<i>bar</i>)	155	155	155
Température de l'eau en entrée du cœur (°C)	286	293	292
Température de l'eau en sortie du cœur (°C)	324	329	330
Débit volumique de l'eau (m ³ /h)	63720	91560	98000
Volume total d'eau primaire (m ³)	274	408	380
Cœur			
Puissance thermique nominale (MW)	2775	3800	4250
Hauteur active (cm)	365,8	426,7	426,7
Diamètre équivalent (cm)	304	337	347
Nombre d'assemblages	157	193	205
Largeur d'un assemblage (mm)	214	214	214
Diamètre des pastilles d' UO_2 (mm)	8,2	8,2	8,2
Quantité d' UO_2 (t)	82	118	125

TAB. 1.1. Caractéristiques des REP.

1.1.2 Description du cœur

Le cœur du réacteur nucléaire est le siège des réactions nucléaires ; il est contenu dans une cuve qui joue le rôle de réservoir en pression et de barrière de protection. Il est composé de

combustible réparti dans des assemblages disposés en damier comme indiqué dans la figure 1.3. Le nombre d'assemblages dépend du modèle de réacteur (157 assemblages pour un 900 MWe, 193 pour un 1300 MWe et 205 pour un 1450 MWe).

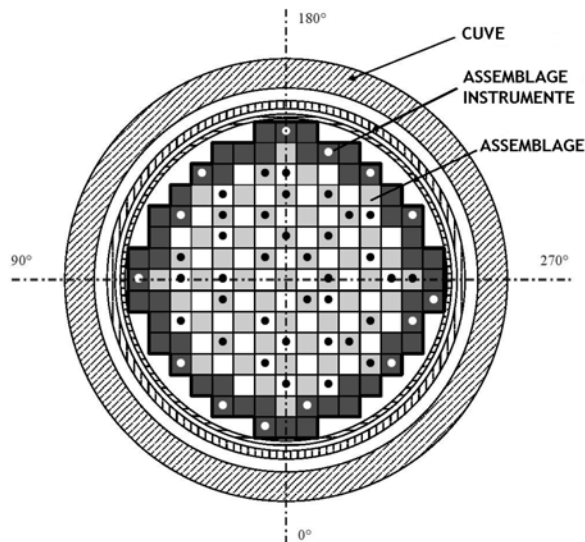


FIG. 1.3. Coupe horizontale 2D d'un cœur 900 MWe.

Chaque assemblage est un bloc de section carrée et de la hauteur du cœur, composé de $17 \times 17 = 289$ "tubes" dont 264 contiennent du combustible et qu'on appelle donc *crayons combustible*. Les 25 tubes restants sont vides et réservés à l'instrumentation du cœur : ils permettent éventuellement l'insertion d'une grappe de commande dans l'assemblage (voir le paragraphe 1.1.3).

Les crayons combustible sont des tubes métalliques fermés (zirconium ou autres alliages) qui contiennent du combustible comprimé en pastilles cylindriques. Ce combustible est constitué, dans les REP français, d'oxyde d'uranium (UO_2) et d'oxyde mixte d'uranium et de plutonium (MOX). La structure de l'assemblage et du crayon est donnée à la figure 1.4. On y devine des grilles de maintien du combustible (grilles inférieure, supérieure et intermédiaires). Ces grilles de maintien sont des grilles métalliques qui absorbent les neutrons. Ainsi on observe une baisse de la puissance dégagée et donc de l'irradiation du combustible dans les zones contenant ces grilles. Le profil axial d'irradiation du cœur présente des "creux" pour chacune de ces zones.

Au cours du fonctionnement du réacteur, le combustible s'épuise, c'est-à-dire qu'il s'appauvrit en noyaux fissiles. Lorsque le réacteur ne peut plus dégager autant de puissance que sa conception le permet, il est nécessaire de renouveler le combustible. Le déchargement et le rechargement du combustible dans les REP s'effectuent après arrêt du réacteur. L'intervalle entre deux rechargements s'appelle une *campagne* ou un *cycle*. Une campagne dure en moyenne 18 mois. Le combustible n'est pas entièrement renouvelé à chaque fois : les assemblages passent, en fonction des modèles, 3 ou 4 cycles en cœur. Au moment du déchargement, on ne remplace que les assemblages ayant subi le nombre maximal de cycles.

Les neutrons ne sont pas répartis de manière homogène dans le cœur. Ils ont tendance à être plus nombreux au milieu du cœur et moins nombreux sur les bords : leur *distribution* dans le cœur ressemble à une "cloche". Cela occasionne un épuisement plus rapide de matière fissile au

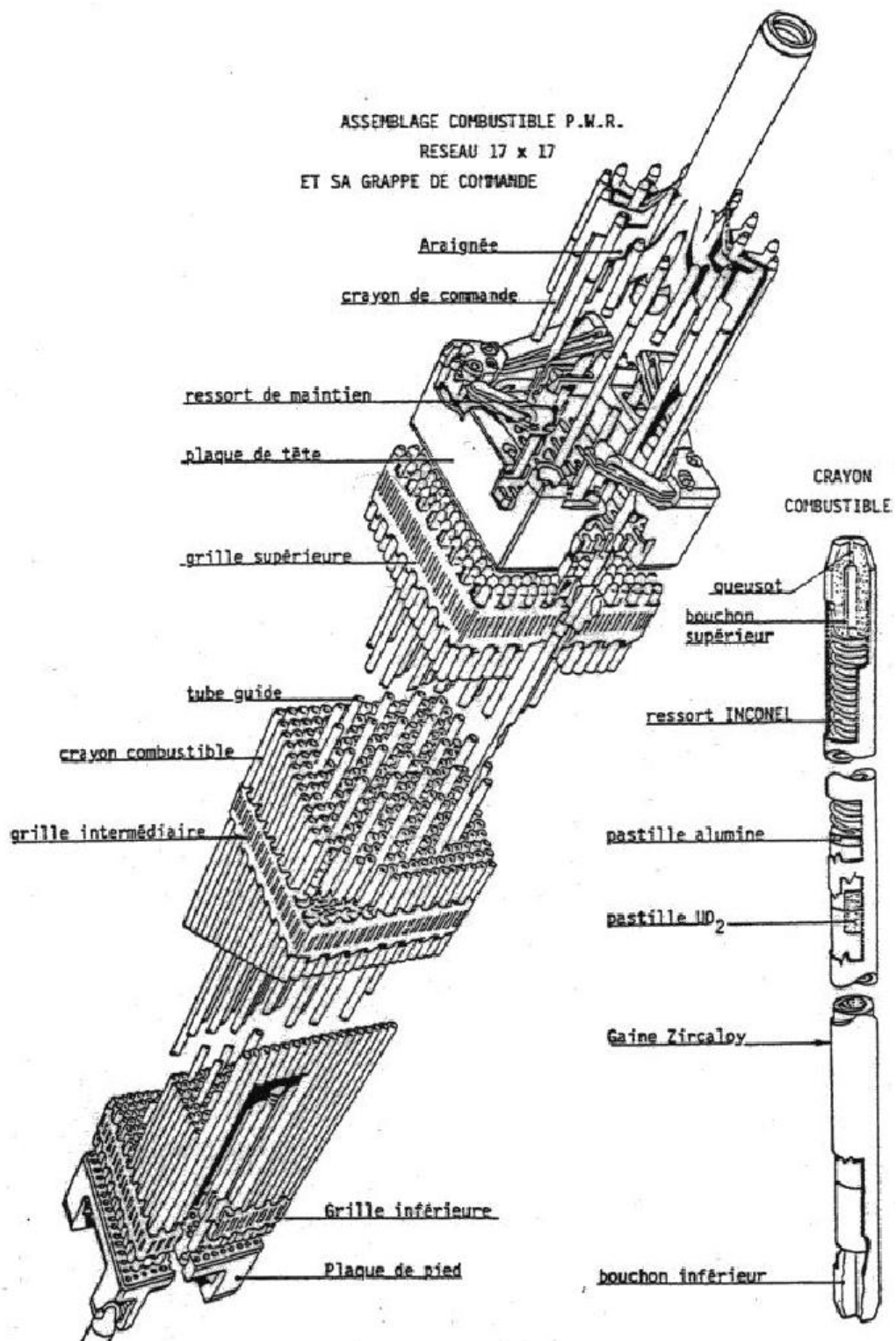


FIG. 1.4. Assemblage et ses crayons.

centre du cœur. Afin d'optimiser l'utilisation du combustible, les assemblages sont positionnés en fonction de leur irradiation, afin d'aplanir le plus possible leur distribution. Le choix de positionnement des assemblages fait l'objet d'études particulières (études des plans de rechargement).

Au cours de la campagne apparaissent dans le combustible de nouveaux noyaux issus des fissions, appelés *produits de fission*. Il en existe des centaines d'espèces mais seules quelques-unes ont un impact sur la réactivité du système. Le xénon et le samarium sont par exemple dénommés *poisons* de par leur très forte capacité à absorber des neutrons, et doivent être pris en compte dans l'établissement du bilan neutronique (bilan des neutrons produits et des neutrons consommés).

Notons qu'il existe deux possibilités pour augmenter le nombre de fissions au sein du combustible : augmenter le nombre de noyaux fissiles (enrichissement du combustible en noyaux fissiles) ou augmenter la probabilité d'interaction des neutrons avec les noyaux fissiles. Dans le cas des REP, les deux options ont été retenues : les neutrons sont ralentis dans la bande d'énergie où la fission d'un noyau d'uranium 235 est la plus probable. Le rôle du ralentisseur de neutrons, le *modérateur* est joué par l'eau du circuit primaire. Cette eau est de l'eau ordinaire et constitue un modérateur très bon marché (il faut néanmoins la déminéraliser). Elle absorbe cependant un peu trop les neutrons ce qui impose l'enrichissement du combustible en uranium 235. Une des principales caractéristiques des REP est donc le double rôle de caloporteur et de modérateur joué par l'eau ordinaire. Il existe d'autres filières comme par exemple la filière à eau lourde (deutérium) qui est un des meilleurs modérateurs (mais cher à fabriquer) et qui permet de ne recourir qu'à de l'uranium naturel (c'est-à-dire non enrichi en noyaux d'uranium 235).

On donne dans le tableau 1.1 quelques ordres de grandeurs du cœur.

1.1.3 Mécanismes de contrôle de la réactivité

Réactivité du cœur et échelles de temps de ses variations

De manière analogue au facteur de multiplication effectif k , la réactivité ρ caractérise la réaction en chaîne. Elle est spécialement employée pour les problèmes de cinétique. Elle est définie par l'égalité

$$\rho = \frac{k - 1}{k}$$

et exprimée en pcm (pour cent mille ou 10^{-5}). L'évolution du nombre de neutrons est donc décroissante (resp. croissante) si $\rho < 0$ (resp. $\rho > 0$). Le nombre de neutrons est stable si la réactivité est nulle.

Les variations de réactivité dans un REP peuvent être importantes et/ou fréquentes. Elles sont entre autres dues à des phénomènes physiques telle que l'usure du combustible ou encore à des mécanismes externes comme des variations de puissance demandées à la centrale. Le moyen d'action sur la réactivité va dépendre de l'échelle de temps du phénomène mis en cause. On distingue des variations de réactivité à 3 échelles de temps différentes :

- variations à long terme (ordre du mois) : épuisement du combustible ;
- variations à moyen terme (ordre de l'heure) : empoisonnement par les produits de fission tel que le xénon ;
- variations à court terme (ordre de la minute) : parmi les effets physiques, on peut citer l'effet Doppler (augmentation des captures stériles des neutrons lorsque la température

du combustible augmente), effet de densité du modérateur (lorsque la température du modérateur augmente, la densité du modérateur diminue et les neutrons étant moins bien ralentis occasionnent moins de fission). Parmi les mécanismes externes, on peut mentionner l'arrêt d'urgence.

Le bore permet de compenser les variations à moyen et long termes. Pour les effets à long terme, il est nécessaire de recourir également à des poisons consommables. Enfin, les barres de commande permettent d'agir de manière quasi instantanée sur la réactivité, donc de compenser les effets à court terme.

Le bore

Le bore est utilisé dans les REP sous forme d'acide borique dilué dans le circuit primaire pour compenser un excès de réactivité. Sa concentration est exprimée en ppm en masse (parties par million) et varie en pratique de 0 à 2500 ppm. C'est l'isotope 10 du bore, présent dans le bore à l'état naturel dans une proportion d'environ 20%, qui présente un intérêt neutronique : son pouvoir de capture des neutrons est suffisamment important pour qu'une faible variation de la concentration en bore, entraîne une variation importante de la réactivité (-8 pcm de réactivité par ppm de bore à puissance nominale).

Compte-tenu du temps pris par les actions de borication (augmentation de la concentration de bore) ou de dilution (diminution de la concentration de bore), son usage est réservé à des phénomènes d'une durée de quelques heures minimum comme l'évolution du xénon lors des transitoires de puissance.

Le bore est également utilisé pour compenser les excès de réactivité du combustible en début de campagne. Sa concentration tend donc à diminuer au fur et à mesure de l'irradiation du combustible pour atteindre une valeur nulle qui signe normalement la fin de la campagne (il est possible de prolonger encore de quelques semaines la campagne, lors d'une période *stretch* en anglais, mais dans ce cas, la puissance totale dégagée par le réacteur est réduite).

Le bore présente l'avantage d'agir de manière homogène dans l'ensemble du réacteur et donc de ne pas perturber la distribution axiale de puissance. Mais par conséquent, il ne peut pas permettre de corriger un déséquilibre axial de puissance.

En dehors de sa lenteur d'action, l'inconvénient majeur de l'utilisation du bore réside dans l'action de dilution qui génère des volumes importants d'effluent à retraiter par la suite.

La teneur en bore dans le primaire est mesurée par un boremètre : la durée de la mesure est d'environ 3 minutes et sa précision est de l'ordre de 3 ppm.

Les grappes de commande

Les grappes de commande sont des absorbants de neutrons qu'on insère dans le cœur par le haut du réacteur pour diminuer la réactivité ou, au contraire que l'on extrait pour augmenter la réactivité. Elles sont constituées de crayons non réactifs et viennent s'insérer dans des espaces laissés vides, les *tubes guide*, de certains assemblages combustibles répartis de manière régulière dans le cœur (assemblages instrumentés). Ces grappes permettent d'avoir une action immédiate sur la réactivité. On en distingue de deux natures différentes : les grappes "noires" fortement absorbantes de neutrons (contiennent 24 crayons) et par opposition les grappes "grises" de plus faible pouvoir absorbant (12 ou 16 crayons).

Ces grappes sont réparties en groupes fonctionnels :

- Les 4 groupes d'arrêt sont composés de grappes noires qui chutent automatiquement dans le cœur en cas de besoin. En fonctionnement normal du réacteur, ces grappes sont toujours extraites du cœur.
- Le groupe de régulation composé de grappes noires est inséré seulement dans la partie haute du cœur et permet de corriger le déséquilibre, ou axial offset, de puissance.
- Les 4 groupes de compensation de puissance composés de grappes grises et noires servent à moduler la puissance dégagée par le réacteur et à corriger également le déséquilibre de puissance.

En dehors de l'arrêt d'urgence, le déplacement des grappes s'effectue pas à pas avec un pas d'environ 16 millimètres et avec une vitesse limite autour de 1.20 mètres par minute (sur une hauteur totale d'environ 4 mètres). Au sein d'un même groupe, les grappes se déplacent de manière synchrone. Le déplacement des grappes d'un groupe par rapport à celles d'un autre groupe suit une séquence propre à chaque mode de pilotage (voir paragraphe 1.1.4).

En cas d'arrêt d'urgence, la chute des grappes d'arrêt se fait en environ 1 seconde.

L'avantage des grappes de commande est leur rapidité d'action, de l'ordre de la minute, qui permet de suivre les variations de puissance très fréquentes mais de faible amplitude. Elles ont cependant un impact sur la distribution axiale de puissance et peuvent donc donner naissance par leurs déplacements à des oscillations axiales du xénon. C'est néanmoins avec un mouvement approprié des grappes de commande qu'on peut corriger ces oscillations axiales.

Les poisons consommables

Les poisons consommables sont des matériaux absorbant les neutrons excédentaires des assemblages neufs en début de campagne. Ils sont soit insérés dans les tubes guides, soit intégrés au combustible et sont généralement à base d'oxyde de gadolinium. Leur action vient compléter celle du bore dont la concentration initiale en début de cycle est limitée pour des raisons de sûreté. Ces poisons se consomment au cours de la campagne de telle sorte qu'ils disparaissent en fin de cycle.

Ces poisons sont généralement placés en région centrale pour permettre également l'aplatissement de la distribution de puissance pour une irradiation plus régulière des assemblages et donc une meilleure gestion du combustible.

Complémentarité du bore et des grappes de commande

En cours de cycle, le bore et les grappes de commande sont les outils dont dispose l'opérateur pour contrôler les variations de réactivité du réacteur et ajuster la puissance produite aux besoins du réseau électrique. Ces deux moyens d'action sont sollicités en fonction de l'amplitude et de la fréquence des variations demandées. La stratégie d'utilisation du bore et des grappes de commande définit un *mode de pilotage* de la centrale.

1.1.4 Conduite du réacteur

Compte-tenu du poids du nucléaire dans la production française d'électricité (près de 80%), les évolutions de puissance demandées par la variation des consommations électriques au cours de la journée doivent être assurées par le parc nucléaire. Cela n'est pas le cas dans le reste du monde où les centrales nucléaires sont exploitées à pleine puissance et où d'autres moyens de production d'électricité assurent l'équilibre entre l'offre et la demande d'électricité. Cette

spécificité française implique donc la gestion de fréquentes variations de la puissance et donc de la réactivité par les moyens de contrôle présentés précédemment : le bore et les grappes de commande. L'objectif du pilotage est donc de répondre à la fois aux besoins du réseau électrique mais aussi à une meilleure utilisation du combustible.

On utilise l'expression *puissance nominale* (en abrégé PN) pour faire référence à l'exploitation du cœur à pleine puissance. Dans le cas contraire, on indique la puissance délivrée par une fraction de la puissance nominale : 80% PN ou 0.8 PN.

Les variations de puissance demandées par le réseau peuvent être regroupées en 3 catégories en fonction de leur amplitude et fréquence :

- Les variations (aléatoires) de faible amplitude (+2% PN à −3% PN) mais très fréquentes correspondent au réglage primaire (ou réglage de fréquence) ; compte tenu de l'échelle de temps des variations, seules les grappes de commande peuvent être utilisées.
- Les variations (toujours aléatoires) de moyenne amplitude ($\pm 5\%$ PN) et assez fréquentes correspondent au réglage secondaire (ou télé-régulation) ; le bore peut être utilisé en complément des grappes mais on cherche à en minimiser l'usage pour éviter des borifications et dilutions trop fréquentes qui conduiraient à l'augmentation du volume d'effluents à traiter.
- Les variations de forte amplitude pouvant aller jusqu'à 60% voire plus et qui peuvent donc être anticipées correspondent au réglage tertiaire (ou suivi de charge). Pour ce type de variation, un compromis entre les grappes et le bore doit être recherché.

La stratégie d'utilisation des grappes et du bore pour la gestion de ces variations motive la définition de modes de pilotage sur la base de critères fixés par l'exploitant. Deux modes de pilotage sont principalement utilisés dans le parc nucléaire français [Cea01]. Le mode A est le premier mode de pilotage utilisé historiquement. Il fait majoritairement appel au bore soluble ; l'utilisation des grappes sert à prévenir l'apparition d'oscillations axiales de puissance (contrôle du déséquilibre axial de puissance dans une bande de $\pm 5\%$ autour d'une référence). Il permet de gérer les transitoires lents et ne permet pas un retour rapide à la pleine puissance. Le mode G a été conçu pour pallier cet inconvénient grâce à l'introduction de grappes grises. Il permet ainsi une meilleure participation au suivi de charge.

Une bonne maîtrise du pilotage s'appuie sur des simulations numériques qui permettent de mieux appréhender le comportement du cœur lors des variations de puissance demandées. Des outils d'aide au pilotage comme le code EDF SimuN1D en cours de déploiement dans le parc [Rou07a], répondent à ce besoin de simulation. Ils requièrent en entrée des informations en temps réel sur l'état du cœur comme la puissance totale dégagée, la température de l'eau en sortie du cœur mais aussi la position des grappes. Les données de puissance et de température sont fournies par un ensemble de capteurs situés en périphérie du cœur. D'autres moyens de mesure complètent l'instrumentation du cœur. Le système informatique temps réel ORLI permet l'acquisition et l'archivage de toutes ces mesures.

1.1.5 Instrumentation des REP

La surveillance des REP s'appuie sur différentes instrumentations qui couvrent la partie nucléaire (mesure du flux par exemple dans le cœur) et la partie non nucléaire du cœur (mesure des grandeurs thermohydrauliques). Toute l'instrumentation de la centrale ne fait pas partie du système de sûreté ; certains capteurs ne sont utiles que pour une bonne gestion du pilotage.

L'instrumentation nucléaire

L'instrumentation du cœur vise principalement à renseigner sur le niveau de flux neutronique au sein du réacteur. En raison du flux élevé de neutrons régnant dans le cœur, il ne peut y avoir d'instrumentation permanente. Les mesures de flux réalisées en continu sont obtenues grâce à des capteurs situés à l'extérieur de la cuve : les chambres externes. Les chambres externes sont des chambres à ionisation et sont, à une hauteur donnée, au nombre de 4 (seulement 2 pour les 900 MWe) pour surveiller le flux neutronique dans chacun des quadrants du cœur. Ces chambres d'une hauteur active d'environ 3 mètres sont positionnées à 30 centimètres de la cuve. L'information qu'elles fournissent est donc assez grossière et renseigne plutôt sur la distribution axiale du flux (pour un réacteur 1300 MWe et N4, on dispose de 6 informations en axial soit 6×4 mesures de valeurs de flux intégrés).

Par ailleurs une mesure quasi continue de la température de l'eau en sortie du cœur est obtenue par une cinquantaine de thermocouples répartis de manière homogène mais non symétrique. Ces thermocouples réalisent une mesure toutes les minutes avec une précision de ± 1.5 degrés Celsius en fonctionnement normal. A partir de ces informations de température, il est possible d'accéder via un bilan enthalpique à la distribution radiale de puissance.

Pour une mesure plus précise du flux neutronique et donc de la puissance délivrée, on dispose de chambres à fission mobiles ou CFM. Ces détecteurs sont introduits dans le cœur à travers le fond de la cuve et poussés jusqu'en haut des assemblages. Ils redescendent ensuite par pas de 8 millimètres pour fournir plus de 600 mesures axiales d'activité. Il n'y a que 6 CFM pour l'ensemble des assemblages instrumentés (58 assemblages instrumentés pour un 1300 MWe) : un même détecteur assure donc la mesure d'une dizaine d'assemblages. L'intercalibration des CFM est assurée par la double mesure de quelques assemblages, par des CFM différents.

Ces mesures d'activité sont fiables (incertitude de l'ordre de 1%) et denses (disponibles pour environ 30% des assemblages) mais ont une fréquence seulement mensuelle. D'autre part elles nécessitent au préalable une stabilisation du cœur (réalisée sur un intervalle allant de 24 à 48h) qui n'est alors plus disponible pour le suivi de charge.

Les outils d'aide au pilotage requièrent également des informations sur la concentration en bore du primaire et la position exacte des grappes. La teneur en bore du primaire est mesurée toutes les 15 minutes par un boremètre avec une incertitude de l'ordre du pour cent. Le boremètre est réétalonné lors des essais périodiques mensuels. La position exacte des grappes est gérée par un système permettant notamment de :

- déplacer ou maintenir en position les grappes,
- surveiller la position réelle des grappes.

En cas d'informations contradictoires entre le niveau de puissance et la position des grappes, ce système peut déclencher l'arrêt automatique du réacteur.

L'instrumentation pour la partie non nucléaire de la centrale

Enfin, signalons qu'il existe un ensemble de dispositifs de mesure permettant d'accéder à des informations liées à la thermohydraulique du réacteur :

- les températures de l'eau en entrée et sortie du cœur sont mesurées à l'aide de sondes ;
- la puissance thermique est déduite des mesures de température (bilan enthalpique) et de débit primaire ;

- les pressions primaire et secondaire sont contrôlées par des capteurs de pression ;
- les débits primaire et secondaire sont également mesurés.

Ces dispositifs de mesure font partie de l'instrumentation permanente mais la plupart ne donnent que des mesures relatives et nécessitent donc un réétalonnage. Celui-ci est effectué lors de l'arrêt du réacteur pour le déchargement/rechargement du combustible (essais physiques de redémarrage).

1.2 Bases de physique neutronique

1.2.1 Éléments de physique nucléaire

Éléments et isotopes

Le noyau d'un atome X contient Z protons, N neutrons soit A nucléons avec $A = Z + N$. Il est noté A_ZX . Le nombre Z appelé numéro atomique caractérise l'élément chimique : pour l'uranium par exemple, $Z = 92$. Les noyaux des atomes d'un même élément chimique peuvent différer par le nombre N de neutrons qu'ils contiennent : on parle alors d'*isotopes* qu'on repère par le nombre A de nucléons dit nombre de masse. Par exemple, l'uranium naturel est constitué à 99.3% de l'isotope ${}^{238}\text{U}$ (146 neutrons), à 0.7% de l'isotope ${}^{235}\text{U}$ (143 neutrons) et de quelques traces de l'isotope ${}^{234}\text{U}$ (142 neutrons).

Les propriétés chimiques d'un élément étant liées à son nombre d'électrons, deux isotopes ne diffèrent guère pour les propriétés usuelles de la matière. Par contre les propriétés nucléaires peuvent fortement varier d'un isotope à un autre. Dans le cas de l'uranium, l'isotope ${}^{235}\text{U}$ est le seul isotope naturel de l'uranium à être fissile par un neutron. Compte tenu de la très faible proportion de l' ${}^{235}\text{U}$ dans l'uranium naturel, des moyens comme la modération des neutrons ou l'enrichissement du combustible, doivent être mis en place pour améliorer le rendement de fission dans les REP.

Stabilité des noyaux et radioactivité naturelle

Pour un même élément chimique, certains nombres N de neutrons conduisent à des noyaux stables et d'autres à des noyaux instables ou *radioactifs*, c'est-à-dire qui se désintègrent spontanément après un laps de temps plus ou moins long. En se désintégrant, le noyau instable se transforme en un noyau stable ou en un autre noyau instable qui se désintégrera à son tour. Cette *décroissance radioactive* s'accompagne de l'émission d'une ou plusieurs particules. Parmi les modes de décroissance radioactive, on distingue notamment la radioactivité α , la radioactivité β , la radioactivité γ reliées au type et au nombre de particules émises.

La probabilité qu'un noyau instable X se désintègre dans un intervalle de temps dt est proportionnelle à dt et vaut $\lambda_X dt$. La constante de proportionnalité λ_X est appelée *constante de désintégration* et s'exprime en s^{-1} . On décrit alors l'évolution au cours du temps du nombre de noyaux instables de type X contenus dans un échantillon, par une loi exponentielle du type :

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda_X t},$$

où N_0 est le nombre initial de noyaux dans l'échantillon. À partir de cette loi, on définit la *demi-vie* T_X comme la durée de temps nécessaire à la disparition de la moitié des noyaux présents à

l'instant initial : $T_X = \ln(2)/\lambda_X$.

La désintégration de l'iode 135 en xénon 135 est par exemple un phénomène de radioactivité de type β (voir figure 1.5) relativement rapide : la demi-vie de l'iode 135 est de l'ordre de 6 heures et 30 minutes.

1.2.2 Introduction à la neutronique

En neutronique on ne considère que les interactions neutrons-matière en négligeant les interactions neutron-neutron. Cette simplification est possible compte-tenu du faible nombre de neutrons comparé au nombre de noyaux du combustible. Les réactions induites par les neutrons sont : la fission, les captures stériles (absorptions) et la diffusion. Ces réactions regroupent des sous-catégories de réaction : par exemple la diffusion peut être un choc élastique ou inélastique du neutron avec un noyau.

Caractérisation de l'interaction des neutrons avec la matière

Les neutrons peuvent interagir avec les noyaux de différentes façons. Chaque type d'interaction avec un noyau est caractérisé par une *section efficace microscopique* σ exprimée en barns (1 barn = 10^{-24} cm²). On peut se représenter la section efficace comme étant la surface du noyau "vue" par le neutron : plus elle est élevée, plus la probabilité d'interaction avec le noyau est forte. Cependant la section efficace n'a pas de lien avec la taille du noyau ; elle dépend de la nature du noyau cible et de l'énergie du neutron incident.

L'interaction du neutron avec un matériau constitué d'un ensemble de noyaux est caractérisée par une *section efficace macroscopique* Σ . La section efficace macroscopique correspond à une constante de proportionnalité : sur un parcours de longueur dx , Σdx représente la probabilité d'interaction du neutron avec la matière traversée. La section Σ est exprimée en cm⁻¹. On définit à partir de Σ le *libre parcours moyen* λ correspondant à la distance moyenne parcourue par le neutron avant une première interaction : $\lambda = 1/\Sigma$ exprimée en cm.

Pour la modélisation de la population neutronique, on utilise les sections macroscopiques suivantes :

- la section de fission Σ_f pour caractériser la fission ; on utilise aussi la section de production $\nu\Sigma_f$ exprimée également en cm⁻¹ pour exprimer le rendement de fission (nombre de neutrons produits par les fissions) ;
- la section de diffusion (scattering en anglais) Σ_s pour définir les chocs sans disparition des neutrons avec les noyaux (les chocs peuvent conduire à un ralentissement du neutron voire à une accélération du neutron quand la vitesse de celui-ci est proche de celle des noyaux environnants) ;
- la section de capture Σ_c qui caractérise toutes les interactions où le neutron est happé par le noyau sans le fissionner et sans être réémis ;
- la section d'absorption Σ_a qui est la somme des sections de capture et de fission ;
- la section totale Σ_t qui est la somme des sections d'absorption et de diffusion : $\Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_a$.

On utilise aussi le spectre de fission, noté χ , qui définit la distribution en énergie des neutrons émis après fission. Dans certaines modélisations simplifiées des phénomènes physiques mis en jeu, on utilise également le coefficient de diffusion D exprimé en cm.

Ces sections dépendent naturellement de la matière traversée mais aussi de l'énergie (vitesse) et de l'angle du neutron incident. Les sections dépendent donc de 3 variables : une variable d'espace \vec{r} , une variable d'énergie E et une direction $\vec{\Omega}$. Dans le cadre de la modélisation des cœurs, on fait l'hypothèse que

- les matériaux sont isotropes. La section totale ne dépend donc pas de la direction du neutron incident et la section de scattering ne dépend que de l'angle formé par les directions du neutron avant et après le choc :

$$\begin{aligned}\Sigma_t(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \Sigma_t(\vec{r}, E), \\ \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) &= \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}').\end{aligned}$$

- les phénomènes de fission sont isotropes :

$$\begin{aligned}\nu\Sigma_f(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \nu\Sigma_f(\vec{r}, E), \\ \chi(E, \vec{\Omega}) &= \chi(E).\end{aligned}$$

Produits de fission, xénon et samarium

La fission d'un noyau par un neutron donne naissance à un ou plusieurs neutrons et à des nouveaux noyaux appelés *produits de fission*. Ils peuvent être solides comme le césium 137 ou gazeux comme l'iode 135 aux températures régnant dans le cœur, et restent confinés à l'intérieur de la gaine du crayon. On en recense environ huit cents dont la plupart sont instables. En se désintégrant, les noyaux instables se transforment en noyaux stables ou en noyaux instables qui se désintégreront à leur tour. Les produits de fission sont donc à l'origine de nombreuses émissions *gamma* qui créent une *puissance résiduelle* lors de l'arrêt du réacteur. Cette puissance résiduelle peut conduire à des contraintes pour le pilotage.

Les produits de fission doivent être pris en compte lors de l'établissement du bilan neutronique car ils absorbent également des neutrons et ont donc une incidence sur la réactivité : c'est le phénomène d'*empoisonnement* du combustible par les produits de fission. Fort heureusement, il n'est pas nécessaire de modéliser l'ensemble des produits de fission, seule une dizaine de produits représentent les trois quarts de l'empoisonnement.

Le xénon et le samarium sont les poisons les plus connus et leur absorption domine largement celle des autres produits de fission : leur concentration continue d'augmenter après un arrêt ce qui constitue un réservoir d'anti-réactivité à prendre en compte pour le redémarrage après un court arrêt du cœur. Le xénon est également connu pour être à l'origine d'oscillations axiales de la puissance.

Flux neutronique

Pour calculer le facteur de multiplication k_{eff} , il est nécessaire de connaître la répartition des neutrons dans le réacteur. On pourrait utiliser la notion de densité de neutrons n (en cm^{-3}) mais on lui préfère la notion de flux neutronique ψ , produit de la densité et du module de la vitesse des neutrons $\psi = n.v$ et exprimé en $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$. Ainsi les *taux de réaction* s'écrivent comme le produit de la section efficace concernée et du flux : par exemple $\Sigma_a\psi$ représente le nombre d'absorption par unité de volume. Le flux neutronique dépend ainsi de 3 variables :

- la variable d'espace \vec{r} ,
- la variable d'énergie E ,
- la variable de direction $\vec{\Omega}$.

L'évolution du flux $\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ dépend des absorptions, fissions et diffusions des neutrons. Cette évolution est décrite par l'équation de Boltzmann qui établit le bilan en tout point du nombre de neutrons produits et du nombre de neutrons consommés. Les méthodes numériques de résolution de l'équation de Boltzmann permettent d'avoir une connaissance précise du flux neutronique mais elles coûtent cher en terme de place mémoire et temps de calcul. Pour des applications de type industriel, on préfère souvent résoudre l'équation de la diffusion, qui est une approximation de l'équation de Boltzmann sous les hypothèses suivantes :

- la diffusion est isotrope : $\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, \vec{\Omega}') = \Sigma_s(\vec{r})$,
- les milieux sont peu hétérogènes,
- la diffusion des neutrons est prédominante par rapport à l'absorption des neutrons.

Le flux calculé par approximation de la diffusion ne dépend donc pas de l'angle $\vec{\Omega}$ d'incidence des neutrons. On le désigne usuellement par la lettre Φ .

Calcul des sections efficaces pour les codes de neutronique

On appelle code de neutronique, un code permettant de calculer le flux neutronique dans un milieu multiplicateur (un cœur par exemple). Les codes de neutronique s'appuient sur des approximations de la physique et de la géométrie réelle. Ces codes ont besoin par exemple de données discrétisées en énergie. Il est donc nécessaire d'exprimer les sections efficaces non plus en fonction d'une variable continue d'énergie mais en fonction d'une variable discrète. La méthode utilisée en neutronique permettant d'aboutir à de telles sections s'appelle l'approximation multigroupe. Elle consiste à découper la variable énergie en intervalles ou "groupes" et calculer une valeur moyenne de la section pour ce groupe. Les sections sont d'abord calculées pour une discrétisation très fine de l'énergie (plusieurs milliers de groupes) et sont ensuite *condensées* en quelques centaines de groupes d'énergie voire en deux groupes d'énergie pour des applications industrielles.

D'autre part, on ne peut pas prendre en compte la géométrie réelle du réacteur : structure complète du crayon, de l'assemblage. Il est indispensable de recourir à une simplification de la géométrie en agglomérant différents composants du cœur. Pour des calculs industriels par exemple, on ne modélise pas les crayons au sein de l'assemblage : on décrit l'assemblage comme une pâte homogène (comprenant de l'eau borée, des structure métalliques, du combustible...) et pour laquelle des sections efficaces *homogénéisées* doivent être calculées.

Le processus permettant d'obtenir des sections condensées en énergie et homogénéisées en espace est complexe et coûteux en temps de calcul. Il est réalisé en amont des codes de neutronique pour le cœur. Les sections sont ensuite stockées dans des bases de données appelées *bibliothèques neutroniques* tabulées en fonction de paramètres représentatifs de l'état de la matière pour lesquels elles ont été calculées :

- taux d'usure du combustible,
- température du milieu,
- concentration de certaines espèces.

Ces paramètres sont appelés paramètres de contre-réactions. Leur choix plutôt qu'un autre pour décrire l'état du cœur dépend de la modélisation retenue.

Chaque calcul de neutronique s'effectue pour un état donné du cœur, c'est-à-dire pour une valeur fixée des paramètres de contre-réactions. Les sections efficaces correspondant à cet état du cœur sont calculées à partir des valeurs stockées dans la bibliothèque selon un modèle appelé *modèle de contre-réactions*.

1.3 Effets du xénon 135

La fission d'un noyau par un neutron donne naissance à un ou plusieurs neutrons et à des nouveaux noyaux appelés *produits de fission*. On en recense environ huit cents mais seule une dizaine représente les trois quarts des effets liés aux produits de fission à savoir : la création de puissance résiduelle et l'absorption supplémentaire de neutrons.

Le xénon 135, noté ^{135}Xe , est le plus connu des produits de fission de par son fort pouvoir d'absorption des neutrons. Il est également à l'origine d'oscillations axiales de puissance.

1.3.1 Dynamique du xénon 135

Formation du xénon 135

Le xénon 135 est un produit de fission gazeux qui apparaît principalement par désintégration β d'un autre produit de fission également gazeux aux températures régnant dans le cœur : l'iode 135. L'iode 135 apparaît lui-même par désintégration β du tellure qui est un produit direct de la fission de l'uranium (dans une proportion de 6.4% des fissions). Le xénon 135 est également produit directement par fission de l'uranium ^{235}U dans une proportion de 0.1%. Il disparaît sous deux processus : par désintégration β (apparition du césium 135 disparaissant également pour donner du baryum 135) ou par capture d'un neutron pour donner du xénon 136 (noyau stable). On donne dans la figure 1.5 la chaîne de formation et de disparition du xénon 135; les temps donnés correspondent à la demi-vie des produits et les constantes γ au rendement de fission de l'espèce considérée.

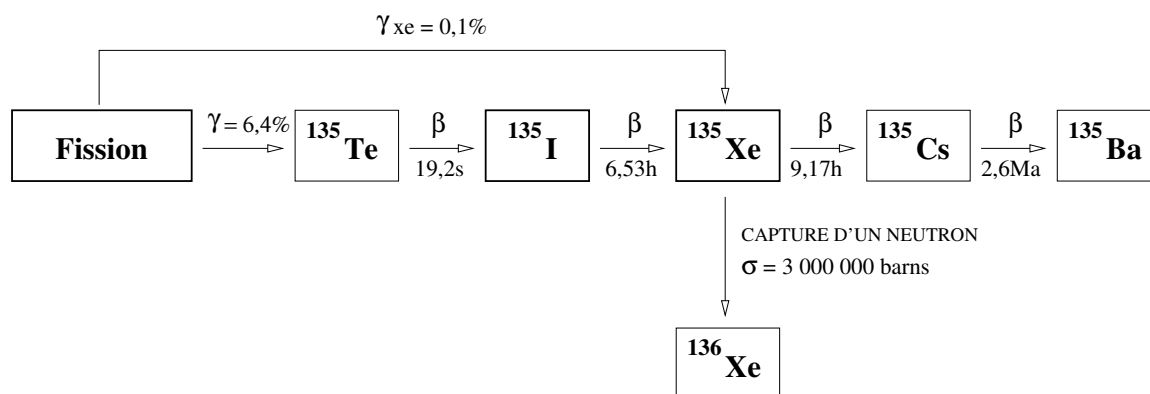


FIG. 1.5. Schéma de formation et de disparition de l'iode 135 et du xénon 135

L'étape de désintégration du tellure peut être négligée car elle est de très courte durée comparée aux autres temps caractéristiques. Quand aux sections de capture de l'iode 135, du césium 135 et du baryum 135, elles sont négligeables comparées à celle du xénon 135. Dans les codes de neutronique, on utilise donc en pratique un schéma simplifié de formation du xénon 135 où seuls l'iode 135 et le xénon 135 apparaissent (figure 1.6).

Équations de la dynamique iode/xénon

On note :

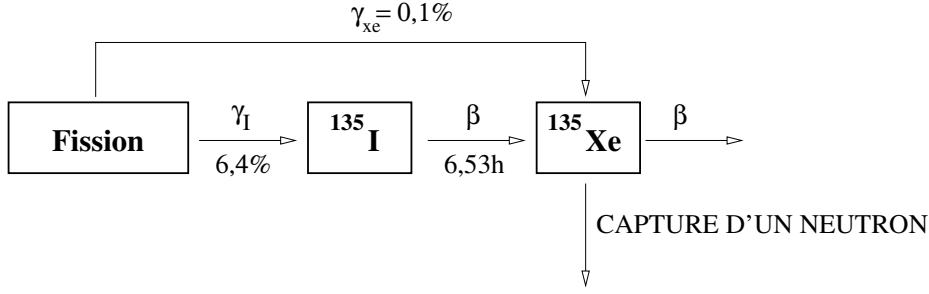


FIG. 1.6. Schéma simplifié de formation et de disparition de l'iode 135 et du xénon 135.

- C_I et C_{Xe} les nombres de noyaux de l'iode 135 et du xénon 135 par cm^3 ,
 λ_I et λ_{Xe} les constantes de décroissance radioactive en s^{-1} ,
 γ_I et γ_{Xe} les rendements de fission de l'iode 135 et du xénon 135,
 Φ le flux neutronique en $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$,
 $\Sigma_f \Phi$ le taux de réaction de fission en $\text{s}^{-1}.\text{cm}^{-3}$,
 $\sigma_{Xe} \Phi C_{Xe}$ le taux de réaction d'absorption dans le xénon en $\text{s}^{-1}.\text{cm}^{-3}$.

D'après le schéma simplifié 1.6, on a les variations suivantes de l'iode 135 et du xénon 135 :

production de l'iode 135

- comme un produit direct de la fission avec un rendement γ_I , soit une production de $\gamma_I \Sigma_f \Phi$ noyaux d'iode 135.

disparition de l'iode 135

- par décroissance radioactive de l'iode 135, soit une disparition de $\lambda_I C_I$ noyaux.

production du xénon 135

- comme un produit direct de la fission avec un rendement γ_{Xe} , soit une production de $\gamma_{Xe} \Sigma_f \Phi$ noyaux de xénon 135 ;
- par décroissance radioactive de l'iode 135, soit une production de $\lambda_I C_I$ noyaux de xénon 135.

disparition du xénon 135

- par décroissance radioactive du xénon 135, soit une perte de $\lambda_{Xe} C_{Xe}$ noyaux ;
- par capture neutronique, soit une disparition de $\sigma_{Xe} \Phi C_{Xe}$ noyaux.

On obtient donc le système différentiel du premier ordre suivant :

$$\begin{cases} \frac{dC_I}{dt} = \gamma_I \Sigma_f \Phi - \lambda_I C_I, \\ \frac{dC_{Xe}}{dt} = \gamma_{Xe} \Sigma_f \Phi + \lambda_I C_I - (\lambda_{Xe} + \sigma_{Xe} \Phi) C_{Xe}. \end{cases} \quad (1.1)$$

Ce système dynamique est non-linéaire car le flux neutronique Φ , présent dans le terme de couplage $-\sigma_{Xe} \Phi C_{Xe}$, dépend du niveau de xénon 135 :

$$\frac{d\Phi}{dt} = \mathcal{F}(C_{Xe}, \Phi).$$

On note donc que **le flux ne dépend pas directement de l'iode**.

Lors de l'avancement du cœur dans le cycle, l'épuisement du combustible engendre une diminution des sections de fission qui entraîne une augmentation du flux neutronique moyen. Lorsque le flux neutronique est élevé, le terme $-\sigma_{Xe}\Phi C_{Xe}$ introduit des instabilités dans la dynamique xénon. La dynamique du xénon est difficile à prédire et reste un enjeu pour la simulation numérique.

On donne, dans le tableau 1.2, les valeurs fréquemment utilisées pour les grandeurs physiques de cette dynamique.

$\lambda_I = 2.93 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	$\lambda_{Xe} = 2.1 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$
$\gamma_I = 6.4\%$	$\gamma_{Xe} = 0.1\%$
$\sigma_{Xe} = 3.1 \times 10^6 \text{ barns}$	

TAB. 1.2. Valeurs type des grandeurs physiques de la dynamique xénon 135 [Pet03].

1.3.2 Propriétés de la dynamique couplée

Empoisonnement par le xénon 135

On définit l'empoisonnement π pour un produit de fission comme le rapport de sa section efficace macroscopique d'absorption à celle du combustible, soit

$$\pi = \frac{\sum_a^{PF}}{\sum_a^U}.$$

Le xénon 135 ayant une très forte absorption des neutrons thermiques, il est considéré comme un poison important dans les REP : son anti-réactivité est d'environ 2000 pcm dans un REP pour un régime à pleine puissance (puissance nominale) [Bar93].

Xénon à l'équilibre

Lorsque le réacteur a fonctionné un certain temps à puissance constante (environ 35 heures), le xénon et l'iode atteignent une valeur à l'équilibre que l'on peut calculer en intégrant le système (1.1) avec $\frac{dC_I}{dt} = 0$ et $\frac{dC_{Xe}}{dt} = 0$:

$$\begin{cases} C_I^{eq} = \frac{\gamma_I \Sigma_f \Phi}{\lambda_I}, \\ C_{Xe}^{eq} = \frac{(\gamma_I + \gamma_{Xe}) \Sigma_f \Phi}{\lambda_{Xe} + \sigma_{Xe} \Phi}. \end{cases}$$

Lorsque le flux est important ($\Phi > 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$), on constate que le niveau de xénon ne dépend plus du flux :

$$C_{Xe}^{eq} \approx \frac{(\gamma_I + \gamma_{Xe})}{\sigma_{Xe}} \Sigma_f.$$

Empoisonnement après arrêt

Lors d'un arrêt du réacteur, on assiste au bout de quelques heures à un phénomène connu sous le nom de *pic xénon*. A l'arrêt, l'iode 135 continue à se désintégrer en xénon 135. Le flux neutronique étant à peu près nul, la disparition du xénon par capture neutronique est très faible et sa concentration continue de croître jusqu'à l'épuisement des noyaux d'iode, ce qui marque le maximum de concentration du xénon. Puis sa concentration rediminue pour atteindre une valeur nulle (dans certains cas extrêmes, cela peut prendre jusqu'à 48 heures). La figure 1.7 illustre ce phénomène.

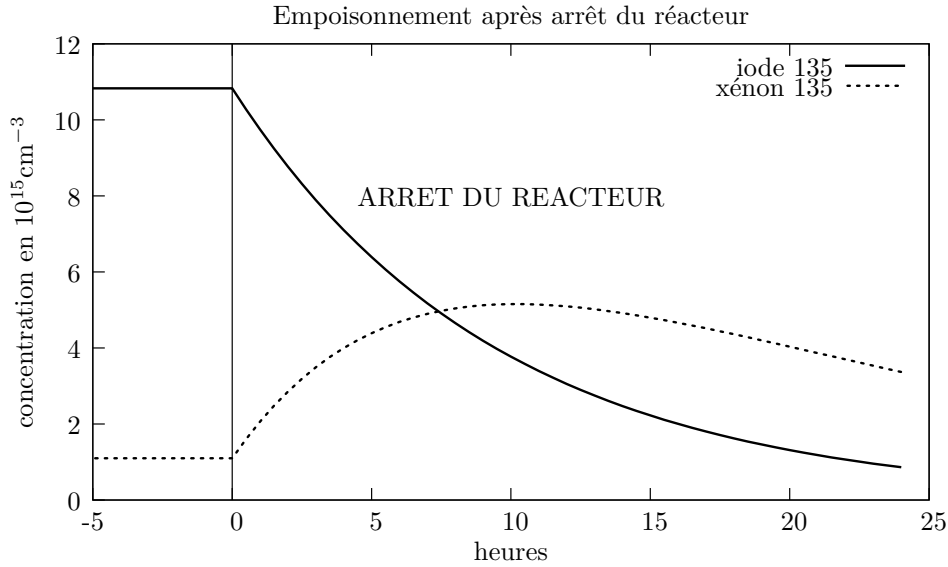


FIG. 1.7. Évolution de l'iode 135 et du xénon 135 dans un réacteur après arrêt.

Ce pic xénon induit des contraintes de pilotage :

- Si l'on souhaite redémarrer le réacteur pendant ce pic de xénon, il faut s'assurer que l'on dispose de suffisamment de réactivité (grappes de commande à extraire ou marge de dilution de bore par exemple) pour compenser le surcroît d'empoisonnement. Ce problème se pose surtout en fin de campagne lorsque le réacteur ne dispose plus que d'une faible marge de réactivité.
- Le xénon 135 étant sujet à des oscillations axiales, il est avantageux de connaître sa distribution au moment du redémarrage afin de mieux estimer la réactivité nécessaire à apporter.

Oscillations axiales du xénon

Le xénon 135 est connu pour être à l'origine d'oscillations axiales de puissance. Ces oscillations sont invisibles au niveau de la puissance totale mais elles sont indésirables pour la bonne tenue du matériel. Elles ont cependant une période suffisamment longue (plusieurs heures) pour laisser le temps à l'opérateur de les amortir à l'aide des grappes de commande et du bore. On surveille ces oscillations en mesurant le déséquilibre axial de puissance (ou axial offset) défini par

$$AO = \frac{P_H - P_B}{P_H + P_B},$$

où P_H et P_B désignent respectivement la puissance dégagée dans les moitiés haute et basse du cœur. Lorsque le déséquilibre est positif, cela signifie qu'il y a plus de puissance produite dans la moitié supérieure du cœur.

Lors de transitoires de puissance, des grappes de commande sont insérées partiellement dans le cœur et conduisent à une diminution du flux neutronique dans la moitié haute du cœur. La diminution du flux entraîne quasi immédiatement (quelques secondes) une diminution de la production d'iode. Comme pour l'empoisonnement après arrêt, le réservoir d'iode continue néanmoins à se "déverser" dans le réservoir de xénon. On assiste donc pendant ce temps à une augmentation du xénon. Cette augmentation du xénon entraîne une hausse des absorptions de neutrons et donc une accélération de la diminution du flux et de la production d'iode. Ce phénomène d'augmentation de la concentration de xénon dans la partie haute du cœur s'inverse lorsque le réservoir d'iode est quasi vide. Il y a alors une diminution de la concentration xénon ce qui entraîne une diminution des absorptions de neutrons et donc une remontée du flux dans la partie haute du cœur. Cette remontée du flux conduit à nouveau à une production d'iode qui va pouvoir alimenter de nouveau le réservoir de xénon. La baisse de flux se réamorce lorsque la production de xénon est supérieure à sa disparition. Ces oscillations se traduisent par des déséquilibres axiaux qui perdurent. On illustre, dans la figure 1.8, la dynamique de ces oscillations axiales. Les barres sont extraites au tout début de la simulation entre les temps 0 et 100 secondes ce qui amorce un axial offset de puissance positif bien visible au bout de la dixième heure suivi d'une augmentation de l'axial offset de l'iode puis plus tard du xénon en même temps que l'axial offset du flux décroît.

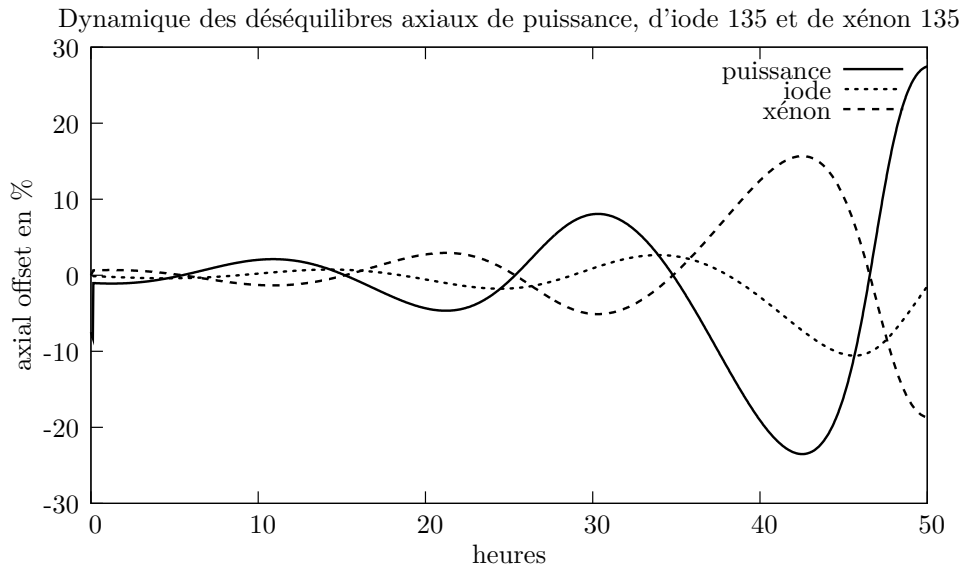


FIG. 1.8. Dynamique des déséquilibres axiaux (axial offsets) de puissance, iode 135 et xénon 135.

Le développement de ces oscillations est rendu possible d'une part du fait du fort pouvoir d'absorption du xénon et de son rendement élevé et d'autre part du fait de la grande taille du réacteur qui limite la diffusion des neutrons émis dans une moitié du cœur vers l'autre moitié. La fréquence de ces oscillations est pilotée en partie par la période de demi-vie de l'iode et donc par λ_I (une constante de décroissance plus élevée aurait conduit à une augmentation des fré-

quences et à une baisse des amplitudes des oscillations). Ces oscillations peuvent soit s'amortir (oscillations convergentes), soit s'amplifier pour atteindre un cycle limite. On parle dans ce cas d'oscillations divergentes (cas de la figure 1.8). Le caractère stable ou instable de ces oscillations axiales de xénon dépend de nombreux paramètres dont le plus connu est le niveau d'irradiation du combustible (voir [Cho94] et [Son97]). Les oscillations divergentes ne sont jamais observées en pratique puisqu'on casse les oscillations dès qu'elles sont détectées. Une oscillation divergente a cependant été réalisée volontairement en 1982 dans la centrale de Tricastin [Fio01].

1.3.3 Panorama des travaux concernant l'étude des effets xénon dans les réacteurs

La détection et la prévision des oscillations axiales de xénon est un enjeu important pour l'optimisation du pilotage du réacteur. Différents modèles ont été proposés afin de mieux appréhender la dynamique xénon. A quelques exceptions près, ces modèles s'appuient sur l'équation de diffusion 1D stationnaire à 1 groupe d'énergie couplée non linéairement aux équations de la dynamique xénon-iode :

$$\begin{cases} D \frac{\partial \Phi(z, t)}{\partial z^2} + \left[\frac{\nu \Sigma_f}{k} - \Sigma_a(z) \right] \Phi(z, t) - \sigma_{Xe} C_{Xe}(z, t) \Phi(z, t) - \alpha(z, t) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} C_I(z, t) = \gamma_I \Sigma_f \Phi(z, t) - \lambda C_I(z, t), \\ \frac{\partial}{\partial t} C_{Xe}(z, t) = \gamma_{Xe} \Sigma_f \Phi(z, t) + \lambda C_I(z, t) - (\lambda_X + \sigma_{Xe} \Phi(z, t)) C_{Xe}(z, t). \end{cases} \quad (1.2)$$

Le terme $\alpha(z, t)$ correspond à la modélisation des contre-réactions neutroniques et varie d'un modèle à un autre : terme nul (modèles de Choi [Cho94], de Kobayashi [Kob82]), terme proportionnel au carré du flux (modèles de Canosa [Can66], d'Onega [One78]), terme dépendant de la concentration en bore, de la température et du flux (modèle de Cho [Cho83]). Par défaut ces modèles sont initialisés par les concentrations xénon et iode à l'équilibre.

Ce modèle simplifié fut cependant jugé encore trop complexe pour des applications temps réel tel que l'aide au pilotage. Des modèles encore plus simplifiés ont été développés à partir du modèle (1.2). Un des modèles les plus connus est le modèle bi-zone proposé par Onega et Kisner [One78]. On a étudié ce modèle en annexe A et on en a développé une implémentation en Python. Il consiste à développer les variables flux, xénon et iode sur le mode fondamental et la première harmonique et à intégrer les équations (1.2) sur chaque moitié du cœur. De ce modèle bi-zone est dérivé un modèle point décrivant les axial offsets du xénon de l'iode et du flux. Une amélioration de ce modèle proposée par Song et Cho [Son97] consiste à développer le flux, le xénon et l'iode sur une base de Fourier plus complète.

Une autre stratégie de simplification très usitée consiste à linéariser les équations (1.2) autour du point d'équilibre. Cette linéarisation se justifie par le fait que le réacteur doit toujours se trouver dans un intervalle de sécurité restreint et donc que les perturbations sur le flux et le xénon sont de petite taille. Cette approximation linéaire se retrouve notamment dans les travaux de Kobayashi [Kob82], Lin [Lin94], Choi [Cho94], Yoon [Yoo85] et dans ceux de Shimazu [Shi07] qui propose une description 3D des oscillations xénon (axiales et radiales) à l'aide d'un modèle linéaire à 4 zones.

Ces modèles très simplifiés de dynamique xénon nécessitent des ajustements afin d'être les plus réalistes possible. Onega propose de recalibrer 3 paramètres de son modèle point (le coefficient de diffusion, la section d'absorption microscopique du xénon et le paramètre de contre-réactions) à partir de mesures de flux neutronique [One79]. La méthode utilisée est celle du maximum de vraisemblance qui correspond donc à une approche probabiliste de type estimation de paramètres (avec prise en compte d'une erreur de mesure). Beaucoup de travaux sont basés sur l'amélioration du recalage de ces 3 paramètres : citons les travaux récents de Domingos [Dom03] et Marseguerra [Mar03] qui proposent de recourir aux algorithmes génétiques. Lin propose également une méthode de recalage de paramètres à l'aide du filtre de Kalman pour le modèle linéarisé [Lin94]. Mais aucun de ces travaux ne remettent en cause l'initialisation des transitoires avec les concentrations xénon et iode à l'équilibre.

Une autre approche probabiliste est proposée par Park et Cho qui construisent un estimateur asymptotique de la distribution axiale du flux et du xénon [Par92]. Ne s'intéressant qu'à la convergence au fil du temps de l'estimateur vers l'état vrai de la dynamique, les concentrations initiales du système sont arbitrairement fixées. La méthode mise en place est proche de celle du filtre de Kalman avec la construction d'une matrice de gain.

Song et Cho remarquent plus tard l'importance de la bonne initialisation de la dynamique xénon. Dans ce but, ils mettent au point un modèle appelé *pre-xenon-oscillation model* qui vise à calculer les concentrations initiales d'une simulation à partir de mesures de l'axial offset de puissance antérieures au temps initial [Son96]. Ces concentrations initiales de xénon et d'iodine s'obtiennent en ajoutant aux concentrations de xénon et d'iodine à l'équilibre, la puissance 1D à l'équilibre et un terme correctif en sinus dont l'amplitude est ajustée avec les mesures d'axial offset. Ce modèle repose sur des hypothèses fortes, notamment la connaissance exacte des concentrations et du champ de puissance 1D à l'équilibre (on suppose donc qu'on dispose d'un modèle parfait). La méthode est testée dans le cadre d'expériences jumelles simulant le démarrage d'un réacteur coréen. Ils montrent que 4 heures suffisent à obtenir une estimation raisonnable des concentrations initiales mais ils notent également que la qualité de leur estimation dépend fortement de la précision des observations. Un autre article complète cette approche en proposant une modélisation plus précise du terme correctif en sinus [Son97].

La stabilité ou l'instabilité des oscillations axiales de xénon dépend de nombreux paramètres dont le plus connu est le niveau d'irradiation du combustible [Son97]. Les différents modèles de dynamique xénon ont servi à identifier d'autres paramètres influençant la dynamique des oscillations xénon. Grâce à leur modèle, Onega et Kisner relient de manière empirique l'instabilité des oscillations à un faible terme de contre-réactions dans l'équation (1.2) [One79]. Beaucoup d'études comme celles de Canosa ou Choi sont faites sur le modèle linéarisé qui permet de suivre l'évolution de perturbations et d'établir des critères de stabilité ou d'instabilité. Canosa détermine un seuil d'instabilité dépendant du terme de contre-réactions α_F de l'équation 1.2 et du niveau de flux maximal en étudiant les interactions entre les vecteurs propres de l'opérateur linéarisé [Can66]. Choi analyse la stabilité des oscillations axiales de xénon à l'aide du critère de NYQUIST qui revient également à étudier les propriétés de l'opérateur linéarisé. Il montre que la montée de l'instabilité est engendrée par une augmentation du niveau de puissance, par un enfoncement plus profond des grappes ou encore par l'avancement dans le cycle [Cho94]. Dans le même esprit, Kobayashi étudie les valeurs propres de son modèle bi-zones linéarisé et établit un critère d'instabilité dépendant des valeurs des sections neutroniques. Ce critère montre notamment que lorsque le combustible s'use et donc que la section de fission diminue, le critère d'instabilité devient plus facile à remplir.

L'amélioration de la modélisation de la dynamique xénon et de la connaissance des conditions d'apparition des oscillations xénon ouvre la voie aux développements d'outils d'aide au pilotage via le contrôle des oscillations xénon. Différents types de stratégie sont proposées dans la littérature. On distingue deux grandes classes : celles qui visent à détecter et à arrêter des oscillations xénon et celles qui visent à prévenir toute formation d'oscillations xénon. Dans la première classe, citons les travaux de Shimazu basés sur un modèle à 4 points [Shi07] et dont la stratégie d'arrêt des oscillations consiste à insérer les grappes pendant un certain temps puis à les retirer [Shi07]. Le contrôle des oscillations consiste alors à déterminer les temps d'insertion et de retrait des barres. Ces paramètres sont déterminés via la minimisation d'une fonction coût calculant l'écart sur 24 heures à un axial offset de puissance donné.

Dans la seconde classe, on trouve les travaux de Cho et Grossman qui proposent une stratégie de suivi de charge en contrôlant la concentration en bore, la température d'entrée et la position des grappes à travers la formulation d'une fonction coût basée sur la donnée d'un profil 1D de puissance à respecter sur la période considérée [Cho83]. Dans ces travaux, le problème quadratique est résolu de manière analytique alors que Yoon et No proposent une résolution numérique avec un algorithme de minimisation de type quasi-Newton (Davidon-Fletcher-Powell) [Yoo85].

Lin et Lin soulignent la difficulté d'estimer précisément les concentrations initiales de xénon et d'iode et proposent de contourner ce problème en cherchant à contrôler seulement l'axial offset xénon et iode à l'aide du filtre de Kalman [Lin94]. Leur stratégie d'élimination des oscillations xénon est basée sur le déplacement des grappes en fonction de l'axial offset de puissance visé et l'axial offset xénon prédit.

2

Introduction à l'assimilation de données

Le calcul de l'état d'un système, tel que le calcul du niveau de criticité d'un réacteur par exemple, requiert un modèle physico-numérique alimenté par des données ou paramètres (par exemple concentration en bore, irradiation du combustible) et éventuellement par des conditions initiales dans le cas d'un système dynamique.

Les sources d'erreur dans ce calcul peuvent être de type modèle et/ou données. Les erreurs de type modèle proviennent de l'approximation plus ou moins fine du phénomène physique modélisé (modélisation 1D du réacteur par exemple) ainsi que de la méthode numérique utilisée pour la résolution du problème (discrétisation plus ou moins grossière des variables du modèle, critère de convergence retenu par exemple). Les erreurs de type données résultent de l'impossibilité de connaître parfaitement les données nécessaires au modèle : débit de l'eau circulant dans le cœur, proportion de l'isotope 10 du bore dans l'acide borique... On peut également inclure dans les erreurs de type données, l'erreur sur la connaissance des conditions initiales.

Pour améliorer la connaissance de l'état du système, on peut chercher à diminuer au maximum l'erreur modèle en augmentant la précision de la modélisation mais cela a un coût en mémoire et temps calcul qui peut être rédhibitoire pour des applications de type temps réel comme le suivi en ligne dans les centrales. Par ailleurs, les données du système ne peuvent pas être connues en dessous d'un seuil d'incertitude et compte tenu de l'approximation réalisée dans le modèle, connaître la valeur réelle d'une donnée peut même être inutile : ce qui importe est de prendre les valeurs des données d'entrée qui permettent de calculer un état du système le plus proche de l'état réel. Cette démarche qui correspond au *recalage de paramètres* est mise à profit depuis longtemps en neutronique sous l'appellation de *qualification de code* : quelques paramètres du modèle sont recalés en fonction de résultats de référence qu'on appellera à partir de maintenant *observations*.

Le recalage de paramètres est une première étape dans l'amélioration de la connaissance de l'état d'un système. Mais il ne permet pas de prendre en compte les erreurs inévitables qui entachent les observations : on peut donc dégrader la solution calculée initialement par le modèle avec des observations de qualité médiocre. D'autre part, il ne permet pas de corriger les conditions initiales d'un système dynamique. Les méthodes d'assimilation ont pour vocation de répondre à ces lacunes.

L'assimilation de données peut être abordée sous différents angles en fonction des habitudes en vigueur dans la discipline concernée : théorie du contrôle, théorie de l'estimation, théorie de l'optimisation. Il en résulte différentes méthodes dont certaines sont équivalentes sous certaines conditions.

On commence dans ce chapitre par donner un aperçu de l'assimilation de données en précisant les notations et le vocabulaire (section 2.1). On présente à la section 2.2, la théorie de l'estimation qui fournit la base des méthodes d'assimilation de données. On peut définir à partir de la théorie de l'estimation, une large gamme d'estimateurs. L'estimateur optimal porte le nom de BLUE (Best Linear Unbiased Estimator). On introduit ensuite à la section 2.3, le filtre de Kalman qui peut être vu comme une extension du BLUE. On décrit également brièvement quelques unes des variantes du filtre de Kalman. Lorsque le coût de calcul de la matrice de gain de Kalman devient trop excessif, les méthodes variationnelles constituent une alternative aux méthodes de type filtre. On développe cette approche variationnelle à la section 2.4. Des éléments de comparaison entre les méthodes de type filtre et les méthodes variationnelles sont donnés dans la section 2.5. On termine enfin ce chapitre par des éléments de mise en œuvre de ces méthodes (modélisation des matrices d'erreur et obtention de l'adjoint du problème).

Il existe une vaste bibliographie sur l'assimilation de données, notamment dans les domaines atmosphériques et océaniques qui ont largement participé à son essor. On recommande notamment la lecture du livre de Daley [Dal91] et des supports de cours de Bouttier et Courtier [Bou99], de Bocquet [Boc05] et de Sportisse et Quélo [Spo04]. On conseille également les articles introductifs de Talagrand [Tal97] et Todling [Tod99]. On donne dans ce chapitre, d'autres références plus spécialisées.

2.1 Bases de l'assimilation de données

2.1.1 Principe

On dispose d'un modèle permettant de calculer l'état présent et éventuellement futur d'un système physique. Ce modèle nécessite des données d'entrée qui peuvent représenter des paramètres et/ou des conditions initiales. L'assimilation de données représente un ensemble de méthodes qui ont pour objectif d'améliorer la connaissance de l'état présent, futur mais aussi passé de ce système en utilisant le modèle ainsi que toute information disponible sur ce système :

- mesures d'un ou plusieurs paramètres du système,
- mesures de champs physiques définissant l'état du système,
- estimation *a priori* de l'état passé et/ou présent du système pouvant provenir d'un précédent calcul.

Les mesures sont appelées *observations* et l'estimation *a priori*, *ébauche*. Ces informations doivent être complétées d'un indice de confiance. Cet indice est représenté par des covariances d'erreurs. Plus la confiance est élevée, plus ces covariances sont faibles et inversement.

En pratique, les méthodes d'assimilation de données consistent à chercher parmi un ensemble d'états possibles un état optimal, c'est-à-dire un état qui représente le meilleur compromis compte tenu des informations disponibles sur le système. Cet état optimal est appelé *état analysé* ou plus simplement *analyse*.

L'analyse peut être le minimum d'une fonction modélisant des écarts par rapport aux informations données (méthodes variationnelles). Elle peut également être la solution d'un système linéaire (interpolation linéaire, filtre de Kalman). On dispose dans ce cas d'un indicateur de confiance pour ce point optimal. Sous certaines hypothèses, ces deux procédés mènent au même état optimal.

Les méthodes d'assimilation de données peuvent être classées en deux grandes catégories : l'assimilation séquentielle et l'assimilation temporelle. Dans la première catégorie, les instants d'observation sont antérieurs à celui de l'analyse. Cette caractéristique rend ces méthodes particulièrement adaptées aux systèmes d'assimilation de données en temps réel. Dans l'assimilation temporelle, les instants d'observation sont antérieurs, simultanés et postérieurs à celui de l'analyse. Les méthodes de cette catégorie conviennent aux ré-analyses.

2.1.2 Notations et définitions

On introduit à présent le vocabulaire usuellement utilisé en assimilation de données.

Système physique, Modèle et vecteur d'état

On dispose d'un *modèle* noté \mathcal{M} permettant de calculer l'état réel d'un système physique. On n'émet pour l'instant aucune hypothèse sur ce modèle. On appelle *vecteur d'état* et on note \mathbf{X} le vecteur dont les composantes sont les variables d'entrées de ce modèle. On note n sa dimension.

Les variables d'entrée peuvent représenter :

- des données physiques comme la pression de l'eau dans le cœur du réacteur, la teneur en uranium 235 dans les crayons combustibles ;
- des données de fonctionnement comme la position des grappes de commande ou la puissance totale dégagée ;
- des champs physiques comme la concentration de xénon 135 ou la température de l'eau dans le réacteur.

En pratique les variables non scalaires du modèle sont discrétisées sur un maillage : le vecteur d'état est donc de dimension finie. Il peut contenir la valeur aux nœuds du maillage ou les degrés de liberté de la discrétisation en éléments finis de la variable. Pour des modélisations 3D, ce vecteur peut alors être de très grande taille.

Remarque : Pour réduire le coût de l'assimilation, on essaie de réduire autant que possible, la taille du problème d'assimilation en n'incluant pas dans celui-ci l'ensemble des composantes du vecteur d'état. On peut en effet juger que certaines sont connues avec suffisamment de précision compte tenu de la sensibilité du modèle aux variations de celles-ci pour qu'il ne soit pas utile de chercher à les recalculer. La position des grappes est par exemple connue de manière exacte sauf à de rares exceptions. Le débit du circuit primaire ne peut pas quant à lui être mesuré parfaitement mais on estime que le niveau de précision est suffisant pour les problèmes modélisés. Dans ces conditions, l'espace du problème d'assimilation ne correspond pas à l'espace du vecteur d'état mais à l'espace du vecteur contenant les variables contrôlées, appelé *vecteur de contrôle*.

Le vecteur d'état permettant de se rapprocher au mieux de la réalité par le modèle qu'on s'est donné est appelé état "vrai" (en anglais *true state*). Il est noté \mathbf{X}^t . Cet état par définition inconnu est l'état visé par le processus d'assimilation. L'ébauche (ou *background* en anglais) de cet état est noté \mathbf{X}^b . L'état analysé est noté \mathbf{X}^a .

Observations et opérateur d'observation

L'ensemble des informations provenant d'observations du système est rassemblé dans un vecteur \mathbf{Y}^{obs} appelé *vecteur d'observation*. On note p sa dimension.

Les composantes de ce vecteur peuvent être

- des mesures en certains points spatiaux, de variables contenues dans le vecteur d'état comme la température de l'eau du primaire en entrée et sortie du cœur,
- des mesures de variables non contenues dans le vecteur d'état comme les activités (mesures intégrées en espace).

Les composantes du vecteur d'observation peuvent donc n'avoir aucune correspondance avec celles du vecteurs d'état et la dimension p du vecteur d'observation est donc indépendante de celle du vecteur d'état.

Ces observations ne sont pas nécessairement réparties de manière régulière dans l'espace et dans le temps. En météorologie, certaines zones spatiales (partie occidentale par exemple) sont très bien recouvertes tandis que d'autres (océans, déserts) sont très pauvres en données. Elles sont d'autre part très hétérogènes et parfois redondantes (mesures radars, mesures de ballons sondes, mesures satellitaires). Depuis la fin des années 70 leur nombre croît de manière exponentielle ce qui impose de faire un tri : en 2003, l'ECMWF recueillait 70×10^6 données mais n'en assimilait que 3.6×10^6 ! En physique des réacteurs, la problématique est tout autre : le nombre, le type des capteurs et la fréquence des mesures ont été déterminés lors de la conception du modèle de réacteur (réacteurs de type 900 MW, 1300 MW...) afin de fournir une information la plus complète possible de l'état du réacteur. Les capteurs fournissent donc des mesures hétérogènes mais spatialement bien distribuées.

Afin de pouvoir établir des écarts entre ce que prédit le modèle et ce qui est observé, on introduit l'opérateur d'observation \mathcal{H} qui projette la variable d'état \mathbf{X} dans l'espace des observations. Cet opérateur peut être non linéaire.

Caractérisation des écarts modèle/observation

Le *vecteur innovation* est défini par $\mathbf{Y}^{obs} - \mathcal{H}(\mathbf{X}^b)$. Il représente l'information supplémentaire apportée par les observations. L'écart entre les observations et leurs équivalents obtenus à l'issue de l'analyse, s'appelle *résidu d'analyse* et est défini par $\mathbf{Y}^{obs} - \mathcal{H}(\mathbf{X}^a)$.

2.1.3 Description des erreurs

Les observations et le modèle ne sont que des approximations de la réalité entachées d'erreur. La bonne caractérisation de ces erreurs est un point essentiel de l'assimilation.

Erreur d'observation

Les différences entre les observations et l'état "vrai" du système peuvent se ranger en

- erreurs de mesure : les instruments de mesure donnent des valeurs entachées d'erreurs ; *a priori* ces erreurs sont aléatoires mais de moyenne et d'écart-type connus.
- erreurs de représentativité : généralement l'opérateur \mathcal{H} qui relie l'espace du vecteur d'état à l'espace des observations est non trivial ; il peut correspondre à un modèle lui-même entaché d'erreurs plus difficiles à appréhender.

On définit donc l'*erreur d'observation* ϵ^{obs} par la relation suivante :

$$\epsilon^{obs} = \mathbf{Y}^{obs} - \mathcal{H}(\mathbf{X}^t).$$

On fait en sorte que l'erreur ϵ^{obs} soit sans biais, c'est-à-dire que $E[\epsilon^{obs}] = 0$, où $E[.]$ désigne l'espérance mathématique. Dans ce cas on définit la matrice de covariance des erreurs d'observation \mathbf{R} par :

$$\mathbf{R} = E[(\epsilon^{obs}).(\epsilon^{obs})^T].$$

La matrice \mathbf{R} est par construction symétrique, de taille $p \times p$ et supposée définie positive. En général, on considère que \mathbf{R} est diagonale ce qui revient à faire l'hypothèse que les erreurs commises sur les observations sont indépendantes les unes des autres. On signale à nouveau que l'estimation de \mathbf{R} est importante puisque la qualité de l'analyse en dépend fortement.

Erreurs d'ébauche et d'analyse

On appelle *erreur d'ébauche* et on note ϵ^b l'écart entre l'estimation *a priori* de l'état et la réalité :

$$\epsilon^b = \mathbf{X}^b - \mathbf{X}^t.$$

On fait également l'hypothèse que l'erreur d'ébauche ϵ^b est de moyenne nulle et on note \mathbf{B} sa matrice de covariance :

$$\mathbf{B} = E[(\epsilon^b).(\epsilon^b)^T].$$

La matrice \mathbf{B} est de dimension $n \times n$ et, comme la matrice de covariance d'erreur d'observation \mathbf{R} , elle est définie positive.

On définit de même l'erreur d'analyse ϵ^a par

$$\epsilon^a = \mathbf{X}^a - \mathbf{X}^t.$$

C'est cette erreur qu'on cherche à réduire dans le processus d'assimilation. On note \mathbf{A} la matrice de covariance d'erreur d'analyse :

$$\mathbf{A} = E[(\epsilon^a).(\epsilon^a)^T].$$

Représentation statistique des erreurs

Les erreurs d'observation, d'ébauche ainsi que les erreurs modèle sont en pratique inconnues et peuvent être vues comme des réalisations de vecteurs aléatoires. La loi $\mathbb{P}_{\underline{X}}$ d'une variable aléatoire réelle (v.a.r. en abrégé) continue \underline{X} est caractérisée par sa densité de probabilité p définie par

$$\mathbb{P}_{\underline{X}}([-\infty, X]) = \int_{-\infty}^X p(t)dt.$$

La forme de la fonction de densité de probabilité renseigne sur le niveau de certitude dans la connaissance de la valeur X de la v.a.r \underline{X} : plus sa forme est étroite, plus le niveau de confiance dans la valeur X est élevée et inversement (figure 2.1).

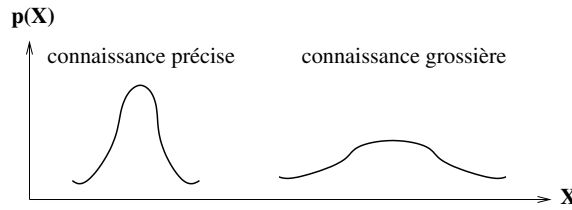


FIG. 2.1. Allure d'une densité de probabilité et niveau de confiance

La densité de probabilité la plus connue est celle de la loi normale gaussienne $\mathcal{N}(m, \sigma)$ dont l'expression est donnée par une exponentielle

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}(x - m)^2\right\},$$

où m et σ désignent respectivement la moyenne et l'écart-type de la v.a.r. Dans \mathbb{R}^n , la loi gaussienne de moyenne $\mu \in \mathbb{R}^n$ et de matrice de covariance Σ est notée $\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$. Sa densité de probabilité s'écrit

$$\mathbf{p}(\mathbf{X}) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} \det(\Sigma)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mu)^T \Sigma^{-1}(\mathbf{X} - \mu)\right\}.$$

Les lois gaussiennes sont majoritairement utilisées en assimilation de données pour caractériser les erreurs. Elles possèdent la propriété de pouvoir être déterminées de manière unique à partir des statistiques du premier ordre (moyenne) et du second ordre (matrice de covariance d'erreur). Or il est très rare d'avoir des informations statistiques de plus haut niveau que le second ordre. Cette propriété est encore plus importante pour le filtre de Kalman présenté un peu plus loin car celui-ci ne propage de manière exacte que les moments statistiques du premier et second ordre. Dans le cas gaussien, il n'y a donc pas de perte d'information au cours du processus.

2.1.4 Critère d'optimalité

L'optimalité d'un estimateur est définie par sa capacité à utiliser toute l'information disponible le mieux possible, c'est-à-dire en tenant compte du niveau de confiance accordé à chaque information. De manière un peu plus pratique, l'optimalité est définie comme la minimisation ou la maximisation de critères choisis en fonction de la performance recherchée :

- minimisation de la variance (donnée par la fonction *trace* de la matrice de covariance d'erreurs \mathbf{A}),
- maximisation de la fonction de vraisemblance (la vraisemblance est définie comme la densité de probabilité de l'état inconnu \mathbf{X}^t , étant donné des observations \mathbf{Y}^{obs}),
- minimisation des r.m.s. (root mean square)

par exemple.

Le filtre de Kalman présenté un peu plus loin est théoriquement optimal quel que soit le critère retenu pour peu qu'il ait un sens. Cela est rendu possible par le fait que dans le cadre linéaire gaussien et pour des erreurs non biaisées et non corrélées, ces différents critères sont équivalents.

2.2 La théorie de l'estimation

On peut trouver les prémices de la théorie de l'estimation dans l'article de Gauss de 1809 [Sor70]. La théorie de l'estimation fournit la base des méthodes d'assimilation de données. Elle s'appuie sur un formalisme probabiliste. On possède, regroupées dans un vecteur $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^p$, des mesures sur un système physique h dépendant de paramètres rangés dans un vecteur $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^n$. On suppose que les mesures sont entachées d'erreurs et qu'elles peuvent donc être considérées comme la réalisation d'un vecteur aléatoire $\underline{\mathbf{Y}}$. De même le vecteur de paramètre \mathbf{X} peut être vu comme la réalisation du vecteur aléatoire $\underline{\mathbf{X}}$. Les vecteurs aléatoires $\underline{\mathbf{X}}$ et $\underline{\mathbf{Y}}$ sont donc reliés entre eux par la relation :

$$\underline{\mathbf{Y}} = h(\underline{\mathbf{X}}) + \underline{\mathbf{V}},$$

où $\underline{\mathbf{V}}$ représente le vecteur aléatoire des erreurs.

Le problème de l'estimation peut être énoncé de la manière suivante : si j'observe une réalisation $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^p$ de $\underline{\mathbf{Y}}$, que puis-je en tirer comme information sur $\underline{\mathbf{X}}$? De manière plus précise, le problème de l'estimation consiste à construire un estimateur de $\underline{\mathbf{X}}$ noté $\hat{\mathbf{X}}$. Un estimateur $\hat{\mathbf{X}}$ de $\underline{\mathbf{X}}$ est une fonction déterministe g qui à toute réalisation \mathbf{Y} du vecteur $\underline{\mathbf{Y}}$ fait correspondre une valeur particulière $\hat{\mathbf{X}}$:

$$\hat{\mathbf{X}} = g(\mathbf{Y}).$$

On peut définir une large gamme d'estimateurs : estimateur des moindres carrés, estimateur de la variance minimale par exemple. Dans le cas où $\underline{\mathbf{X}}$ et $\underline{\mathbf{Y}}$ sont des vecteurs aléatoires ayant des densités de probabilités, l'estimateur $\hat{\mathbf{X}}$ appartient à la famille des estimateurs de Bayes.

2.2.1 Approche bayésienne

On se place dans le cadre des statistiques bayésiennes où les vecteurs aléatoires ont des densités de probabilité. L'approche bayésienne consiste à rechercher l'état le plus probable \mathbf{X} connaissant les observations \mathbf{Y} . Les estimateurs de Bayes sont donc basés sur la fonction de densité conditionnelle $p_{\underline{\mathbf{X}}|\underline{\mathbf{Y}}}(\mathbf{X}|\mathbf{Y})$. De manière pratique, cette fonction de densité est obtenue via la règle de Bayes :

$$p_{\underline{\mathbf{X}}|\underline{\mathbf{Y}}}(\mathbf{X}|\mathbf{Y}) = \frac{p_{\underline{\mathbf{Y}}|\underline{\mathbf{X}}}(\mathbf{Y}|\mathbf{X})p_{\underline{\mathbf{X}}}(\mathbf{X})}{p_{\underline{\mathbf{Y}}}(\mathbf{Y})},$$

où la densité de probabilité $p_{\underline{\mathbf{Y}}}(\mathbf{Y})$ est généralement donnée tandis que $p_{\underline{\mathbf{Y}}|\underline{\mathbf{X}}}(\mathbf{Y}|\mathbf{X})$ se calcule à partir du modèle $\mathbf{Y} = h(\mathbf{X})$ liant \mathbf{X} aux observations.

L'expression des estimateurs de Bayes $\hat{\mathbf{X}}$ est obtenue en minimisant un risque de Bayes :

$$E \left[C(\hat{\mathbf{X}}(\underline{\mathbf{Y}}) - \underline{\mathbf{X}}) \right] \quad (2.1)$$

où $C(\hat{\mathbf{X}}(\underline{\mathbf{Y}}) - \underline{\mathbf{X}})$ est une fonction coût positive que l'on choisit. Par exemple, l'estimateur $\hat{\mathbf{X}}$ du minimum d'erreur quadratique moyenne de $\underline{\mathbf{X}}$ sachant $\underline{\mathbf{Y}}$ minimise le risque suivant [Leg06] :

$$E[|\hat{\mathbf{X}}(\underline{\mathbf{Y}}) - \underline{\mathbf{X}}|^2].$$

Lorsque la loi de probabilité conditionnelle est gaussienne, cet estimateur se confond avec l'estimateur du minimum de variance, l'estimateur du maximum de vraisemblance ainsi qu'avec l'estimateur optimal fourni par ailleurs par le filtre de Kalman.

On présente ci-après l'interpolation statistique dont l'extension dans une approche séquentielle est donnée par le filtre de Kalman. Dans la suite, on utilise le terme d'analyse emprunté à l'assimilation de données plutôt que le terme statistique d'estimateur et on ne fait plus de distinction entre variable aléatoire et réalisation.

2.2.2 Interpolation statistique

L'interpolation statistique permet de construire une famille d'estimateurs linéaires à laquelle appartient l'estimateur BLUE présenté plus loin. Dans l'interpolation statistique, l'analyse est recherchée sous la forme d'une combinaison linéaire du terme d'ébauche et des observations

$$\mathbf{X}^a = \mathbf{L}\mathbf{X}^b + \mathbf{K}\mathbf{Y}^{obs}. \quad (2.2)$$

où \mathbf{L} et \mathbf{K} sont des matrices de dimension respective $n \times n$ et $p \times p$. Cette méthode n'utilise que les observations réalisées au temps présent de l'analyse. Il n'y a donc pas de prise en compte d'un modèle de dynamique ce qui la rend peu coûteuse. Elle est obtenue sous les hypothèses suivantes :

- l'opérateur d'observation \mathcal{H} est linéaire : on le note dans la suite \mathbf{H} et on a donc $\mathbf{Y}^{obs} = \mathbf{H}\mathbf{X}^t + \epsilon^{obs}$;
- l'erreur d'ébauche est sans biais : $E[\epsilon^b] = 0$;
- l'erreur d'observation est sans biais : $E[\epsilon^{obs}] = 0$.

Les matrices \mathbf{L} et \mathbf{K} de l'équation (2.2) sont déterminées en utilisant la contrainte que l'erreur commise sur l'analyse ϵ^a soit sans biais. Un rapide calcul donne l'expression de l'erreur ϵ^a en fonction des erreurs d'ébauche ϵ^b , d'observation ϵ^{obs} et de l'état vrai \mathbf{X}^t :

$$\epsilon^a = \mathbf{X}^a - \mathbf{X}^t = \mathbf{L}\epsilon^b + \mathbf{K}\epsilon^{obs} + (\mathbf{L} + \mathbf{K}\mathbf{H} - \mathbf{Id})\mathbf{X}^t.$$

On obtient donc l'expression de la moyenne de ϵ^a :

$$E[\epsilon^a] = \mathbf{L}E[\epsilon^b] + \mathbf{K}E[\epsilon^{obs}] + (\mathbf{L} + \mathbf{K}\mathbf{H} - \mathbf{Id})E[\mathbf{X}^t].$$

En utilisant les hypothèses d'erreurs non biaisées, l'analyse est donc obtenue en imposant $\mathbf{L} = \mathbf{Id} - \mathbf{K}\mathbf{H}$. On en déduit l'expression de \mathbf{X}^a :

$$\mathbf{X}^a = \mathbf{X}^b + \mathbf{K}(\mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X}^b).$$

Le vecteur $\mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X}^b$ est appelé vecteur d'innovation. La matrice \mathbf{K} est usuellement appelée matrice *gain* ; on la retrouve également dans l'expression du filtre de Kalman. A ce stade, la matrice \mathbf{K} n'est pas déterminée. On peut la fixer en imposant que l'analyse soit l'estimateur du minimum de variance. L'estimation linéaire porte alors le nom d'*estimation optimale*.

L'estimation optimale (BLUE)

L'estimation optimale consiste à rechercher l'analyse linéaire sans biais et de variance minimale. L'analyse s'appelle dans ce cas BLUE (Best Linear Unbiased Estimator). Elle nécessite des hypothèses supplémentaires portant sur les matrices de covariance d'erreur \mathbf{B} et \mathbf{R} non utilisées jusqu'à présent :

- les matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} sont des matrices définies positives ;
- les erreurs sont non corrélées $cov(\epsilon^b, \epsilon^{obs}) = 0$.

On résume ci-après les étapes permettant d'obtenir l'expression de la matrice \mathbf{K} . Le détail des calculs peut être trouvé dans [Bou99]. Le calcul de la matrice d'erreur d'analyse \mathbf{A} en fonction de la matrice \mathbf{K} donne l'expression suivante :

$$\mathbf{A}(\mathbf{K}) = (\mathbf{Id} - \mathbf{KH})\mathbf{B}(\mathbf{Id} - \mathbf{KH})^T + \mathbf{KRK}^T.$$

Minimiser la variance de l'analyse revient à minimiser la quantité $Tr(\mathbf{A}(\mathbf{K}))$. La variation de $Tr(\mathbf{A})$ par rapport à \mathbf{K} étant définie par :

$$\delta(Tr(\mathbf{A}(\mathbf{K}))) = 2Tr((-\mathbf{Id} - \mathbf{KH})\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{KR})(\delta\mathbf{K})^T),$$

on en déduit que la matrice gain optimale notée \mathbf{K}^* vérifie

$$-(\mathbf{Id} - \mathbf{K}^*\mathbf{H})\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{K}^*\mathbf{R} = 0.$$

L'expression de \mathbf{K}^* est alors donnée par

$$\mathbf{K}^* = (\mathbf{B}\mathbf{H}^T)(\mathbf{R} + \mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T)^{-1}$$

et dans ce cas, l'expression de la matrice d'erreur d'analyse est la suivante :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{Id} - \mathbf{K}^*\mathbf{H})\mathbf{B}.$$

L'expression de l'analyse BLUE est donc donnée par le système suivant

$$\begin{cases} \mathbf{X}^a &= \mathbf{X}^b + \mathbf{K}^*(\mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X}^b), \\ \mathbf{K}^* &= \mathbf{B}\mathbf{H}^T(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}. \end{cases} \quad (2.3)$$

Remarque 1 En notant que

$$\mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X}^a = \mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X}^b + \mathbf{H}(\mathbf{X}^b - \mathbf{X}^a) = (\mathbf{Id} - \mathbf{H}\mathbf{K})(\mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X}^b),$$

on en déduit que la matrice $\mathbf{Id} - \mathbf{KH}$ fait le lien entre le vecteur d'innovation et le résidu d'analyse $\mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X}^a$.

Remarque 2 On peut obtenir une autre expression équivalente de la matrice gain optimale \mathbf{K}^* grâce à la formule de Sherman-Morrison-Woodbury

$$\mathbf{K}^* = (\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{H})^{-1}\mathbf{H}^T\mathbf{R}^{-1}.$$

Cette expression de \mathbf{K}^* présente deux intérêts. D'une part, l'inversion matricielle porte sur une matrice de taille $p \times p$ au lieu de $n \times n$. Or la taille p du vecteur des observations est généralement beaucoup plus petite que la taille n du vecteur d'état, ce qui rend l'opération d'inversion moins coûteuse. D'autre part, cette expression permet d'établir l'équivalence entre l'approche BLUE et l'approche variationnelle. On peut en effet montrer que l'analyse BLUE minimise la fonctionnelle coût suivante :

$$J(\mathbf{X}) = (\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) + (\mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{Y}^{obs} - \mathbf{H}\mathbf{X}).$$

L'interpolation optimale

L'interpolation optimale (OI) développée par Gandin en 1963 [Gan63] et présentée notamment dans [Lor81] et [Dal91] est une simplification algébrique du BLUE, qui permet d'obtenir une analyse avec un coût calcul bien plus faible que ce dernier. Elle correspond à l'application de la méthode BLUE à chacune des n composantes du vecteur d'état \mathbf{X} . L'IO repose alors sur l'hypothèse que pour chacune de ces variables, seul un nombre réduit d'observations est déterminant pour calculer l'estimateur correspondant. L'IO consiste alors à déterminer ces observations pertinentes en définissant un voisinage d'influence autour de la variable. Une fois les observations sélectionnées, le calcul de \mathbf{K} se résume à n calculs de matrices de gain encore de taille $n \times n$ mais ne faisant intervenir que des produits et inversions matricielles de taille réduite (cette taille correspond au nombre d'observations retenues).

L'inconvénient majeur de cette méthode réside dans la sensibilité de l'analyse au choix des voisinages d'influence. Et contrairement à ce que son nom pourrait laisser penser, l'analyse produite par l'IO est sous-optimale par rapport à l'ensemble des informations disponibles ; elle est seulement localement optimale à l'instant de l'analyse. Elle est cependant l'une des variantes du BLUE parmi les plus utilisées en météorologie et en océanographie.

2.3 Filtre de Kalman

Le filtre de Kalman introduit en 1960 par R.E. Kalman, se présente comme une extension de l'estimation optimale (BLUE) pour les systèmes dynamiques linéaires. Son principal avantage est de fournir l'incertitude sur l'analyse par le calcul de la matrice des covariance d'erreur d'analyse. Son inconvénient en revanche est le coût en mémoire et temps calcul occasionné par la construction de la matrice de gain et la mise à jour de la matrice de covariance d'erreur d'analyse. Des variantes du filtre de Kalman consistent justement à réduire le coût calcul en diminuant la taille du vecteur de contrôle (filtres sous optimaux, [Tod94]). Il existe également des versions du filtre de Kalman pour des systèmes dynamiques non linéaires (filtre de Kalman étendu, [Eve94][Eve03]).

2.3.1 Principe

On dispose de n séries d'observation réalisées aux temps t_1, t_2, \dots, t_n et d'un modèle dynamique² linéaire noté $\mathbf{M}_{i,i-1}$ permettant de calculer l'évolution de l'état entre les instants t_{i-1} et t_i :

$$\mathbf{X}(t_i) = \mathbf{M}_{i,i-1}\mathbf{X}(t_{i-1}).$$

A ce modèle, on associe une erreur modèle notée ϵ^m et de matrice de covariance \mathbf{Q}_i au temps t_i . Cette erreur modèle permet de caractériser l'imperfection du modèle par rapport à la réalité :

$$\mathbf{X}^t(t_i) = \mathbf{M}_{i,i-1}\mathbf{X}^t(t_{i-1}) + \epsilon^m(t_{i-1}).$$

L'opérateur d'observation est supposé linéaire. Comme pour le modèle d'évolution, on lui attache une erreur notée ϵ^{obs} et définie par

$$\mathbf{Y}^{obs}(t_i) = \mathbf{H}_i\mathbf{X}^t(t_i) + \epsilon^{obs}(t_i).$$

²On utilise sans distinction les expressions modèle dynamique et modèle d'évolution

La matrice de covariance d'erreur d'observation au temps t_i est notée \mathbf{R}_i .

Le filtre de Kalman est une extension de l'estimation optimale pour les systèmes dynamiques : à chaque nouveau temps de mesure t_i , on calcule l'analyse optimale $\mathbf{X}^a(t_i)$ à partir des termes d'ébauche et d'observation au temps t_i . Le terme d'ébauche provient ici du calcul d'évolution de l'analyse au temps précédent t_{i-1} : $\mathbf{X}^b(t_i) = \mathbf{M}_{i,i-1}\mathbf{X}^a(t_{i-1})$. On préfère alors le nommer *prévision* (ou *forecast* en anglais) et le noter $\mathbf{X}^f(t_i)$; on indice également par f sa matrice d'erreurs qui est notée ci-après $\mathbf{P}^f(t_i)$. On note $\mathbf{P}^a(t_i)$ la matrice d'erreur d'analyse au temps courant t_i . Le filtre de Kalman est basé sur les hypothèses suivantes :

- les erreurs d'observation et de modèle sont non biaisées (même hypothèse que dans le BLUE) :

$$E[\epsilon^{obs}(t_i)] = 0 = E[\epsilon^m(t_i)] = 0 ;$$

- les erreurs d'observation et de modèle sont non corrélées :

$$E[(\epsilon^{obs}(t_i))(\epsilon^m(t_i))^T] = 0.$$

Son algorithme comprend 3 étapes :

étape prévision : l'estimation de l'état courant et sa matrice d'erreur sont calculées à partir de l'analyse précédente

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^f(t_i) &= \mathbf{M}_{i,i-1}\mathbf{X}^a(t_{i-1}), \\ \mathbf{P}_i^f &= \mathbf{M}_{i,i-1}\mathbf{P}_{i-1}^a\mathbf{M}_{i,i-1}^T + \mathbf{Q}_{i-1},\end{aligned}$$

calcul du gain de Kalman : le gain est calculé de manière semblable à ce qui est fait dans l'estimation optimale

$$\mathbf{K}_i = \mathbf{P}_i^f \mathbf{H}_i^T \left[\mathbf{R}_i + \mathbf{H}_i \mathbf{P}_i^f \mathbf{H}_i^T \right]^{-1},$$

étape analyse : les observations de l'état courant sont utilisées pour corriger l'état prédit

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^a(t_i) &= \mathbf{X}^f(t_i) + \mathbf{K}_i [\mathbf{Y}^{obs}(t_i) - \mathbf{H}_i \mathbf{X}^f(t_i)], \\ \mathbf{P}_i^a &= [\mathbf{Id} - \mathbf{K}_i \mathbf{H}_i] \mathbf{P}_i^f.\end{aligned}$$

2.3.2 Propriétés du filtre de Kalman

Optimalité : Cet algorithme fournit le meilleur filtre, au sens de la variance minimale, parmi les filtres linéaires non biaisés sous les hypothèses suivantes :

- le modèle, noté \mathbf{M} , et l'opérateur d'observation, noté \mathbf{H} sont linéaires,
- les erreurs sont des bruits blancs (i.e. indépendantes en temps et non corrélées entre elles).

De plus si les erreurs du système suivent des lois gaussiennes, alors le filtre de Kalman est le meilleur filtre parmi tous les filtres qui puissent être construits [May79]. Ce résultat trouve sa justification via l'approche bayésienne présentée précédemment.

Implémentation et coût du filtre de Kalman Dans la référence [Tod94], R. Todling donne le nombre d'opérations requises pour une implémentation "brute de force" du filtre de Kalman. Lorsque la dimension de l'analyse est beaucoup plus grande que le nombre d'observations (i.e. $n \gg p$), l'étape la plus coûteuse du filtre correspond au calcul de la matrice d'erreur de prévision (en $O(n^3)$) suivie de celle du calcul de la matrice gain. Ce coût peut être rédhibitoire pour de très grands systèmes. En pratique, ce coût peut être réduit par une implémentation plus

“intelligente” (réduction de la place mémoire en tenant compte des symétries des matrices, opérations matricielles exploitant le caractère creux de certaines matrices par exemple).

Il faut cependant prendre garde à l'ordre dans lequel sont calculées les matrices de covariance car le filtre de Kalman y est sensible en terme de précision voire même de convergence. Le calcul de la matrice de covariance d'erreur d'analyse peut par exemple être calculée de manière équivalente par la formule classique :

$$\mathbf{P}_i^a = (\mathbf{Id} - \mathbf{K}_i \mathbf{H}_i) \mathbf{P}_i^f,$$

ou la formule de Joseph

$$\mathbf{P}_i^a = (\mathbf{Id} - \mathbf{K}_i \mathbf{H}_i) \mathbf{P}_i^f (\mathbf{Id} - \mathbf{K}_i \mathbf{H}_i)^T + \mathbf{K}_i \mathbf{R} \mathbf{K}_i^T.$$

La seconde formule est plus coûteuse en nombre d'opérations mais elle est plus stable vis-à-vis des erreurs d'arrondis (sensibilité à l'ordre 2 contre sensibilité à l'ordre 1 pour la première formule).

2.3.3 Obtention du filtre de Kalman par l'approche bayésienne

Pour obtenir plus de détails sur la construction du filtre de Kalman du point de vue bayésien, on peut consulter [Leg06][Cam06]. On considère une suite de vecteurs aléatoires $\underline{\mathbf{X}}_k$ à valeurs dans \mathbb{R}^n vérifiant l'équation d'état suivante

$$\underline{\mathbf{X}}_k = \mathbf{M}_k \underline{\mathbf{X}}_{k-1} + \underline{\mathbf{W}}_k,$$

où le vecteur aléatoire $\underline{\mathbf{W}}_k$ à valeurs dans \mathbb{R}^n représente une erreur modèle. On considère d'autre part une suite d'observations $\underline{\mathbf{Y}}_k$ à valeurs dans \mathbb{R}^p vérifiant

$$\underline{\mathbf{Y}}_k = \mathbf{H}_k \underline{\mathbf{X}}_k + \underline{\mathbf{V}}_k,$$

où le vecteur aléatoire $\underline{\mathbf{V}}_k$ à valeurs dans \mathbb{R}^p représente une erreur de mesure. On pose les hypothèses suivantes :

- la condition initiale $\underline{\mathbf{X}}_0$ est gaussienne, de moyenne $\bar{\mathbf{X}}_0$ et de covariance \mathbf{Q}_0^X ,
- la suite $(\underline{\mathbf{W}}_k)$ est un bruit blanc gaussien de matrice de covariance \mathbf{Q}_k^W ,
- la suite $(\underline{\mathbf{V}}_k)$ est un bruit blanc gaussien de matrice de covariance \mathbf{Q}_k^V ,
- les suites $(\underline{\mathbf{W}}_k)$ et $(\underline{\mathbf{V}}_k)$ et la condition initiale $\underline{\mathbf{X}}_0$ sont mutuellement indépendants.

L'objectif est d'estimer le vecteur aléatoire $\underline{\mathbf{X}}_k$ à partir des observations $\underline{\mathbf{Y}}_0 \dots \underline{\mathbf{Y}}_k$ de façon optimale et récursive. On a vu précédemment que le problème de l'estimation bayésienne se ramène à la minimisation d'un risque de Bayes défini en (2.1). L'évaluation de ce risque nécessite le calcul de la loi conditionnelle du vecteur aléatoire $\underline{\mathbf{X}}_k$ sachant $\underline{\mathbf{Y}}_0 \dots \underline{\mathbf{Y}}_k$ soit le calcul de la fonction de densité conditionnelle $p_{\underline{\mathbf{X}}_k | \underline{\mathbf{Y}}_0 : \underline{\mathbf{Y}}_k}$ appelée filtre.

Le calcul de cette fonction de densité s'opère en deux étapes (une étape de prévision et une étape de correction) selon le schéma suivant

$$p_{\underline{\mathbf{X}}_{k-1} | \underline{\mathbf{Y}}_{0:k-1}} \xrightarrow{\text{prévision}} p_{\underline{\mathbf{X}}_k | \underline{\mathbf{Y}}_{0:k-1}} \xrightarrow{\text{correction}} p_{\underline{\mathbf{X}}_k | \underline{\mathbf{Y}}_{0:k}}.$$

étape de prévision : l'estimateur de l'état $\underline{\mathbf{X}}_k$ connaissant les observations passées $\underline{\mathbf{Y}}_0 : \underline{\mathbf{Y}}_{k-1}$ est obtenu à partir de l'estimateur $\hat{\mathbf{X}}_{k-1}$ de l'état passé et de l'équation d'état

$$\hat{\mathbf{X}}_k^f = \mathbf{M}_k \hat{\mathbf{X}}_{k-1} + \underline{\mathbf{W}}_k.$$

On en déduit les expressions de la moyenne $\bar{\mathbf{X}}_k$ et de la matrice de covariance \mathbf{Q}_k^X de cet estimateur

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{X}}_k &= \mathbf{M}_k \hat{\mathbf{X}}_{k-1}, \\ \mathbf{Q}_k^X &= E[(\mathbf{M}_k \hat{\mathbf{X}}_{k-1} + \mathbf{W}_k)(\mathbf{M}_k \hat{\mathbf{X}}_{k-1} + \mathbf{W}_k)^T] = \mathbf{M}_k \mathbf{P}_{k-1} \mathbf{M}_k^* + \mathbf{Q}_k^W.\end{aligned}$$

où on a utilisé les différentes hypothèses de moyennes nulles et de non corrélations.

étape de correction : l'estimateur $\hat{\mathbf{X}}_k$ de l'état \mathbf{X}_k connaissant les observations $\mathbf{Y}_0 : \mathbf{Y}_k$ est défini en adoptant comme critère d'optimalité le critère du minimum d'erreur quadratique vu précédemment. Ce critère revient à poser

$$\hat{\mathbf{X}}_k = E[\mathbf{X}_k | \mathbf{Y}_{0:k}].$$

En développant on obtient l'expression suivante :

$$\hat{\mathbf{X}}_k = \hat{\mathbf{X}}_k^f + E[\mathbf{X}_k - \hat{\mathbf{X}}_k^f | \mathbf{I}_k],$$

où le terme d'innovation \mathbf{I}_k est défini par

$$\mathbf{I}_k = \mathbf{Y}_k - E[\mathbf{Y}_k | \mathbf{Y}_{0:k-1}].$$

Cela signifie qu'on corrige l'estimation précédente en prenant en compte l'observation \mathbf{Y}_k ou plus particulièrement, l'information contenue dans \mathbf{Y}_k et n'existant pas dans les observations précédentes. L'estimateur optimal de \mathbf{X}_k est alors donné par la formule

$$\hat{\mathbf{X}}_k = \hat{\mathbf{X}}_k^f + \mathbf{Q}_k^X \mathbf{H}_k^T (\mathbf{H}_k \mathbf{Q}_k^X \mathbf{H}_k^T + \mathbf{Q}_k^V)^{-1} (\mathbf{Y}_k - \mathbf{H}_k \hat{\mathbf{X}}_k^f),$$

qui correspond bien aux notations près à l'expression de l'analyse du filtre de Kalman vu précédemment.

2.3.4 Déclinaisons du filtre de Kalman

Le filtre de Kalman est utilisé dans de nombreuses applications mais son coût d'implémentation pour des systèmes de grandes tailles le rend inapplicable pour de nombreux domaines. D'autre part les différentes hypothèses nécessaires à sa mise en œuvre (linéarités des opérateurs, connaissance des statistiques) sont souvent non vérifiées. Pour ces raisons, il existe une quantité de variantes au filtre de Kalman. On présente ci-après trois grandes familles de déclinaison du filtre de Kalman.

Filtre de Kalman étendu

Le filtre de Kalman classique est basé sur des hypothèses de linéarité de l'ensemble des opérateurs rentrant en jeu. Cette contrainte forte peut être levée en linéarisant les opérateurs : c'est le filtre de Kalman étendu ou extended Kalman filter (EKF).

On fait l'hypothèse que $\mathbf{X}^a(t_i)$ est suffisamment proche de $\mathbf{X}^f(t_i)$. Dans ce cas, on a :

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{i,i-1}(\mathbf{X}^a(t_i)) &\approx \mathcal{M}_{i,i-1}(\mathbf{X}^f(t_i)) + \mathbf{M}_{i,i-1|\mathbf{X}^f(t_i)}(\mathbf{X}^a(t_i) - \mathbf{X}^f(t_i)), \\ \mathcal{H}_i(\mathbf{X}^a(t_i)) &\approx \mathcal{H}_i(\mathbf{X}^f(t_i)) + \mathbf{H}_{i|\mathbf{X}^f(t_i)}(\mathbf{X}^a(t_i) - \mathbf{X}^f(t_i)),\end{aligned}$$

où $\mathbf{M}_{i-1,i|\mathbf{X}^f(t_i)}$ et $\mathbf{H}_{i|\mathbf{X}^f(t_i)}$ sont les linéaires tangents de $\mathcal{M}_{i,i-1}$ et \mathcal{H}_i . Ces linéaires tangents interviennent dans le calcul de la matrice d'erreur d'analyse et dans la matrice de gain :

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{K}}_i &= \mathbf{P}_i^f \mathbf{H}_{i|\mathbf{X}^f(t_i)}^T \left[\mathbf{R}_i + \mathbf{H}_{i|\mathbf{X}^f(t_i)} \mathbf{P}_i^f \mathbf{H}_{i|\mathbf{X}^f(t_i)}^T \right]^{-1}, \\ \tilde{\mathbf{P}}_i^a &= \left[\mathbf{Id} - \tilde{\mathbf{K}}_i \mathbf{H}_{i|\mathbf{X}^f(t_i)} \right] \mathbf{P}_i^f.\end{aligned}$$

Ces matrices linéaires tangentes n'interviennent cependant pas dans le terme d'innovation. On a donc la correction suivante :

$$\mathbf{X}^a(t_i) = \mathbf{X}^f(t_i) + \tilde{\mathbf{K}}_i \left[\mathbf{Y}^{obs}(t_i) - \mathcal{H}_i(\mathbf{X}^f(t_i)) \right],$$

où le terme de prévision est calculé avec l'opérateur de dynamique non linéaire :

$$\mathbf{X}^f(t_i) = \mathcal{M}_{i,i-1}(\mathbf{X}^a(t_{i-1})).$$

Si les non linéarités sont importantes, il peut être nécessaire d'introduire des erreurs supplémentaires dans l'erreur modèle représentée par la matrice \mathbf{Q} ou alors d'utiliser des outils mieux adaptés aux dynamiques non linéaires comme le filtre de Kalman d'ensemble.

Filtres sous optimaux

Le coût numérique occasionné par le calcul de la matrice de covariance d'erreur de prévision pour les systèmes de grande taille, a conduit au développement de schémas sous optimaux (ou SOS pour SubOptimal Schemes) pour alléger cette étape. L'approximation de la matrice d'erreur de prévision est motivée par le manque d'informations concernant les erreurs modèles voire les erreurs d'observation. Les différentes approximations possibles sont classées par Todling en 6 familles de schémas sous optimaux [Tod94] :

- modélisation des covariances d'erreur sans prise en compte de dynamique,
- simplification de la dynamique utilisée pour propager les erreurs de prévision,
- réduction de la précision des schémas spatio-temporels pour le calcul des erreurs de prévision,
- propagation des erreurs pour seulement certains points suffisamment éloignés (approximation locale)
- filtrage réduit pour les systèmes linéaires en fixant la matrice de gain,
- recours à des méthodes de Monte-Carlo pour estimer la matrice de covariance d'erreur de prévision.

La comparaison réalisée par Todling entre différents schémas sous-optimaux implémentant ces approximations montre qu'il est essentiel de modéliser correctement la matrice de covariance des erreurs modèles. Les erreurs modèles sont malheureusement souvent mal appréhendées.

Filtres d'ensemble

Le filtre de Kalman d'ensemble proposé par Evensen [Eve94] vise à réduire le coût de calcul des matrices de covariance d'erreur d'ébauche et d'analyse en estimant statistiquement leur valeurs : on construit un n-échantillon (ou *ensemble*) d'analyses $\left(\mathbf{X}_j^a(t_i) \right)_{j=1..n}$ en réalisant plusieurs assimilations à partir de tirages aléatoires de l'ébauche et des observations corrélativement aux lois de ces dernières. Les différentes analyses obtenues par ce procédé permettent d'estimer

statistiquement les erreurs d'analyse en calculant la moyenne des variances des erreurs d'analyse sans de coûteuses inversions de matrices à réaliser :

$$\mathbf{P}_i^a \approx \frac{1}{n} \sum_j E[(\mathbf{X}_j^a(t_i) - \bar{\mathbf{X}}^a(t_i))(\mathbf{X}_j^a(t_i) - \bar{\mathbf{X}}^a(t_i))^T].$$

L'étape de propagation de la matrice d'analyse, qui correspond au calcul de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche pour le temps suivant t_{i+1} , est remplacée également par le calcul de la moyenne des variances des erreurs d'ébauche obtenues en propageant les différentes analyses de l'ensemble :

$$\mathbf{P}_{i+1}^b \approx \frac{1}{n} \sum_j E[(\mathbf{M}_{i+1,i} \mathbf{X}_j^a(t_i) - \mathbf{M}_{i+1,i} \bar{\mathbf{X}}^a(t_i))(\mathbf{M}_{i+1,i} \mathbf{X}_j^a(t_i) - \mathbf{M}_{i+1,i} \bar{\mathbf{X}}^a(t_i))^T].$$

L'inconvénient de cette méthode est que le rang des matrices de covariance ainsi estimées est égal à la taille de l'ensemble et par conséquent l'étape de correction du terme d'ébauche ne doit pas être réalisée avec l'approximation de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche sous peine de n'obtenir que des analyses se situant dans le sous espace engendré par l'échantillon initial au temps t_1 . Il existe plusieurs techniques pour remédier à ce problème.

2.4 Méthodes variationnelles

L'approche filtre est un point de vue hérité des années 70 pour l'assimilation des données satellites. L'approche variationnelle introduite dans les années 50 par Sasaki et développée sous l'impulsion des sciences de l'atmosphère fait un bond à partir du milieu des années 80. Elle représente une alternative au filtre de Kalman lorsque le coût de calcul de la matrice de gain devient trop excessif. Il est possible d'établir des équivalences entre ces deux approches en posant certaines hypothèses.

Le principe de base des méthodes variationnelles revient à faire varier l'état du système pour se rapprocher le plus possible des observations. En pratique cela consiste à rechercher le minimum d'une fonction coût mesurant la distance aux observations et à l'ébauche. Les méthodes variationnelles ne sont donc pas issues de la théorie de l'estimation. Elles nécessitent néanmoins des statistiques afin de pondérer les différents termes de la fonction coût. Pour plus de détails sur les méthodes variationnelles, on peut se référer à [Cou87], [LD86] et [Tal87] par exemple.

2.4.1 Méthode 3DVAR

La méthode 3DVAR est une méthode séquentielle : elle n'utilise que les observations au temps présent de l'analyse et ne requiert donc pas de modèle d'évolution. Elle consiste à chercher l'état permettant de se rapprocher au mieux des données au temps courant d'ébauche et d'observation, compte tenu des incertitudes sur ces données. La fonction coût du 3DVAR s'exprime donc comme la somme pondérée des écarts à l'ébauche et aux observations au temps présent :

$$J_{3DVAR}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) + \frac{1}{2}(\mathbf{Y}^{obs} - \mathcal{H}(\mathbf{X}))^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}^{obs} - \mathcal{H}(\mathbf{X})), \quad (2.4)$$

où les matrices de covariance des erreurs d'ébauche \mathbf{B} et d'observation \mathbf{R} permettent d'accorder plus ou moins de poids à l'une des deux distances en fonction de la confiance que l'on accorde à l'information. On rappelle que ces matrices doivent être symétriques définies positives. L'opérateur d'observation \mathcal{H} permet de ramener le vecteur d'état dans le bon espace dans le cas où

l'espace des observations est différent de celui du vecteur d'état. Contrairement au filtre de Kalman, cet opérateur peut être non linéaire. On peut ajouter des contraintes supplémentaires dans la fonction coût pour forcer par exemple la vérification d'une loi. Cela peut cependant dégrader la convergence de l'algorithme de minimisation.

La méthode 3DVAR est simple à mettre en œuvre du point de vue algorithmique et il n'y a pas de produit matriciel à effectuer ni de matrice à stocker ce qui la rend utilisable pour des problèmes de grande taille. Il existe cependant quelques difficultés à dépasser. D'une part, la minimisation de la fonction coût nécessite généralement la connaissance du gradient

$$\nabla J_{3DVAR}(\mathbf{X}) = \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}^{obs} - \mathcal{H}(\mathbf{X})),$$

où la matrice \mathbf{H}^T de taille $p \times n$ représente l'adjoint de l'opérateur d'observation \mathcal{H} . Si cet opérateur est lui-même un modèle d'un système physique, l'obtention du gradient de la fonction coût peut être problématique en terme de coût de développement et de calcul. Une autre difficulté réside dans la modélisation des matrices de covariance \mathbf{B} et \mathbf{R} . Enfin, on peut rencontrer des problèmes dans la minimisation si l'opérateur \mathcal{H} est fortement non linéaire et introduit des minima locaux.

Compte tenu des hypothèses portées sur \mathbf{B} et \mathbf{R} (matrices symétriques définies positives), si l'opérateur d'observation est linéaire, alors la fonction coût est convexe. Dans ce cas, l'analyse de la méthode 3DVAR correspond à l'estimateur BLUE (formule de Sherman-Morrison-Woodbury vue précédemment). et la matrice de covariance d'erreur d'analyse est alors donnée par l'expression :

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}.$$

Pour calculer l'analyse, il est donc possible de choisir la plus intéressante des deux approches, compte tenu par exemple de la taille du problème.

2.4.2 Méthode 4DVAR

La méthode 4DVAR est à la méthode 3DVAR ce que le filtre de Kalman est à l'estimation optimale : elle introduit une dimension temporelle dans l'assimilation des données. On ne cherche plus à recalculer un état mais une trajectoire sur une fenêtre de temps donné, la *fenêtre d'assimilation*, en tenant compte des observations disponibles dans la fenêtre d'assimilation. C'est donc une méthode temporelle : l'ensemble des observations passées, présentes et futures au temps de l'analyse sont prises en compte ; on dit que le 4DVAR est un *lisseur*.

On donne ci-dessous l'expression de la fonction coût du 4DVAR. Par rapport à celle du 3DVAR, elle comporte une somme d'écarts aux observations à différents temps ainsi que des opérateurs d'évolutions $\mathcal{M}_{i,0}$ permettant de propager au temps t_i l'état initial au temps t_0 :

$$J_{4DVAR}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \right)^T \mathbf{R}_i^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \right). \quad (2.5)$$

On impose toujours que les matrices de covariance d'erreur soient symétriques, définies positives. Les matrices de covariance d'erreur d'observation peuvent en principe dépendre du temps et sont donc indexées par i . Il est possible également de faire dépendre l'opérateur d'observation du temps.

Dans la formule classique du 4DVAR, on considère que le modèle est parfait. Il est possible d'introduire des termes modélisant les écarts entre la trajectoire prédite par le modèle et l'état vrai ($\mathbf{X}^t(t_i) - \mathcal{M}_{i,i-1}(\mathbf{X}(t_{i-1}))$) mais cela peut générer des instabilités si les erreurs modèle sont importantes.

De même que pour la méthode 3DVAR, la minimisation de la fonction coût nécessite souvent le gradient de la fonction coût :

$$\nabla \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}) = \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}_b) + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}))).$$

Ce gradient nécessite à la fois l'adjoint de l'opérateur d'observation mais aussi l'adjoint de l'opérateur d'évolution. Cet élément peut être un point bloquant s'il s'agit de développer *a posteriori* l'adjoint d'un code : il est souvent impossible sur des gros codes de développer l'adjoint sans y avoir réfléchi au moment de la conception du code direct.

2.4.3 Qualités de l'analyse

Dans un cadre linéaire (opérateurs d'observation et de dynamique linéaires), on peut montrer la relation suivante entre la matrice de covariance d'erreur d'analyse \mathbf{A} et la matrice hessienne de la fonction coût du 4DVAR.

$$\nabla^2 \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}^a) = \mathbf{A}^{-1}.$$

Ce résultat développé dans [Bou99] s'appuie sur l'expression de la matrice hessienne

$$\nabla^2 \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}) = \mathbf{B}^{-1} + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})$$

et sur le fait que \mathbf{X}^a annule la dérivée de la fonction \mathcal{J}_{4DVAR} .

On déduit de ce résultat que la matrice de covariance d'erreur d'analyse et donc que la qualité de l'analyse sont proportionnelles à la convexité de la fonction coût \mathcal{J}_{4DVAR} . (figure 2.2).

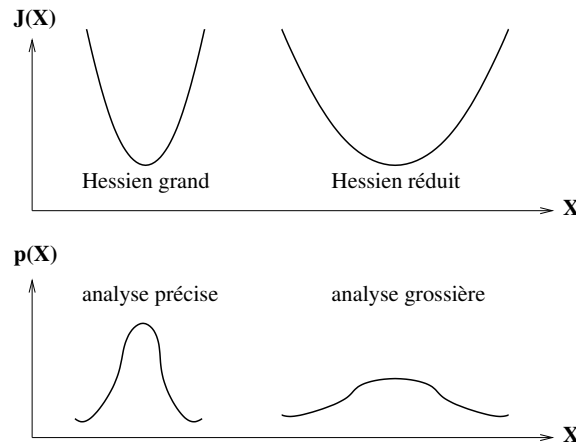


FIG. 2.2. Illustration en 1D de la relation entre la convexité de \mathcal{J}_{4DVAR} et la densité de probabilité de l'analyse.

2.4.4 Méthodes variationnelles avancées

Principe des méthodes incrémentales

Le 4DVAR incrémental décrit dans [Cou94] consiste à réduire le coût de calcul du 4DVAR en transformant le problème de minimisation non linéaire en une suite de problèmes de minimisation linéaire (voir figure 2.3). Le problème incrémental comporte donc deux boucles :

la boucle externe où la fonctionnelle coût est linéarisée autour d'un vecteur \mathbf{X}^k et exprimée en fonction de l'incrément $\delta\mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^k$:

$$J_{4DVARincr}^k(\delta\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(\delta\mathbf{X} + \mathbf{X}^k - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\delta\mathbf{X} + \mathbf{X}^k - \mathbf{X}^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (H_{\mathbf{X}_k} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}^k} \delta\mathbf{X} - \mathbf{d}^k)^T \mathbf{R}_i^{-1} (H_{\mathbf{X}_k} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}^k} \delta\mathbf{X} - \mathbf{d}^k),$$

où les matrices $\mathbf{H}_{\mathbf{X}^k}$ et $\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}^k}$ sont les opérateurs d'observation et de dynamique linéarisés autour de \mathbf{X}^k et $\mathbf{d}^k = \mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^k))$. Cette boucle externe est initialisée avec le terme d'ébauche : $\mathbf{X}^{k=0} = \mathbf{X}^b$.

la boucle interne où est résolu le problème de minimisation quadratique suivant

$$\mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k + \min_{\delta\mathbf{X}} J_{4DVARincr}^k(\delta\mathbf{X}).$$

Cet algorithme à deux boucles doit converger vers la solution du problème non linéaire bien qu'il n'y ait aucune preuve théorique de convergence.

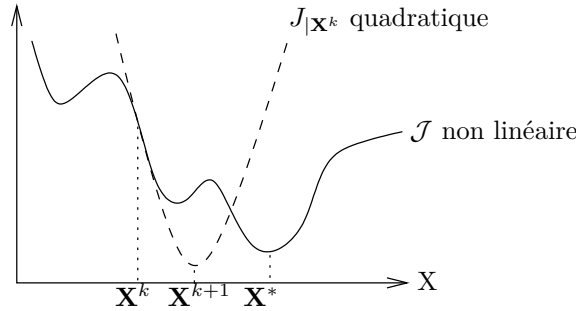


FIG. 2.3. Illustration du principe de fonctionnement des méthodes incrémentales.

Du point de vue de l'implémentation, il est possible de réduire le temps de calcul en résolvant la boucle interne avec une approximation spatio-temporelle plus grossière. Il faut dans ce cas définir un opérateur permettant d'exprimer l'itéré "fin" \mathbf{X}_k sur une grille plus grossière.

Préconditionnement des fonctionnelles

La rapidité de convergence de l'algorithme de minimisation est relié au conditionnement de la fonctionnelle coût \mathcal{J}_{4DVAR} défini comme étant le ratio de la plus grande valeur propre sur la plus petite de la matrice hessienne de \mathcal{J}_{4DVAR} . Plus le conditionnement est proche de l'unité, meilleure sera la convergence de l'algorithme. Dans ce but, on cherche un preconditionnement de \mathcal{J}_{4DVAR} , c'est-à-dire un opérateur linéaire bijectif $\mathbf{L} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ tel que la fonctionnelle coût $\tilde{\mathcal{J}}_{4DVAR}$ définie par :

$$\tilde{\mathcal{J}}_{4DVAR}(\mathbf{U}) = \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{L}^{-1}\mathbf{X}) \quad \text{avec } \mathbf{X} = \mathbf{L}\mathbf{U},$$

ait un meilleur conditionnement que \mathcal{J}_{4DVAR} . Un tel opérateur \mathbf{L} est appelé *préconditionneur*.

Puisque la matrice hessienne de $\tilde{\mathcal{J}}_{4DVAR}$ est donnée par l'expression :

$$\mathbf{L}^T \nabla^2 \mathcal{J} \mathbf{L},$$

le meilleur préconditionnement consiste à choisir L de sorte que $\mathbf{L}^T \nabla^2 \mathcal{J}_{4DVAR} \mathbf{L} = \mathbf{Id}$ soit $\mathbf{L} = \nabla^2 \mathcal{J}_{4DVAR}^{-1/2}$. Ce dernier étant trop coûteux à calculer, on cherche généralement des approximations. En assimilation variationnelle, on prend généralement $\mathbf{L} = \mathbf{B}^{-1/2}$ où $\mathbf{B}^{1/2}$ est le facteur de Cholesky. Cela permet d'exprimer la fonctionnelle coût sous la forme :

$$\tilde{\mathcal{J}}_{4DVAR}(\mathbf{U}) = \mathbf{U}^T \mathbf{U} + \tilde{\mathcal{J}}^{obs}(\mathbf{U}).$$

2.4.5 Qualités et défauts de l'approche variationnelle

Le principal avantage de l'approche variationnelle est qu'il n'y a pas de matrice à calculer ni à stocker : elle est donc plus adaptée à des problèmes de grande taille. D'autre part les hypothèses de linéarité des opérateurs de dynamique et d'observation peuvent être relâchées. En revanche, les algorithmes de minimisation requièrent souvent le gradient de la fonction coût. Dans le cas de la méthode 4DVAR où le modèle de dynamique est utilisé, il est alors nécessaire de disposer de l'adjoint de ce modèle. Cette condition peut être un point bloquant à la mise en œuvre des méthodes variationnelles dans des disciplines où l'adjoint des codes n'existe pas et où son développement pourrait se révéler coûteux en temps de travail.

La contre-partie de l'absence de matrice à évaluer est la disparition d'informations sur la qualité de l'analyse. Le filtre de Kalman étant équivalent aux méthodes variationnelles sous certaines hypothèses (voir section 2.5.2), il est donc possible de connaître l'erreur d'analyse en calculant une matrice d'erreurs d'analyse à partir des formules du filtre. Mais on perd dans ce cas l'intérêt des méthodes variationnelles du point de vue du coût de calcul.

Enfin, notons que l'approche variationnelle classique suppose que les erreurs modèles sont nulles, c'est-à-dire que le modèle est parfait : on dit que le modèle est sous contrainte forte. Comme dans le filtre de Kalman, il est possible d'introduire une erreur modèle dans la fonction coût. Cependant cela revient à augmenter considérablement la taille de l'espace de contrôle et donc le coût de la méthode variationnelle [Tré07].

2.5 Comparaison du filtre de Kalman et des méthodes variationnelles

On résume ci-après les caractéristiques du filtre de Kalman et du 4DVAR puis on donne les conditions d'équivalence de ces deux méthodes. On propose enfin une ébauche de conclusion sur l'opportunité d'utilisation de l'une ou l'autre de ces deux méthodes.

2.5.1 Caractéristiques du filtre de Kalman et du 4DVAR

Le filtre de Kalman a été développé pour des systèmes linéaires. Il existe à présent de nombreuses variantes de ce filtre qui permettent de l'appliquer sur des modèles non linéaires. Il permet de prendre en compte une erreur modèle. Il fournit un niveau de confiance sur l'analyse grâce au calcul de la matrice de covariance d'erreur d'analyse. Compte tenu des produits matriciels à effectuer, il est moins bien adapté à des problèmes de grande taille.

Le 4DVAR s'applique indifféremment à des systèmes linéaires ou non linéaires et est adapté aux systèmes de grande taille. Son implémentation classique ne comprend pas d'erreur modèle. Il ne fournit pas par construction d'information sur la qualité de l'analyse.

2.5.2 Équivalence entre le filtre de Kalman et le 4DVAR

Sur le même intervalle temporel $[t_0, t_N]$, pour une dynamique linéaire, on suppose que le modèle est parfait (i.e. $\mathbf{Q} = 0$) et que les deux algorithmes utilisent les mêmes informations (mesures, ébauche et matrices d'erreurs). Alors il y a équivalence entre [Coh98] :

- l'analyse **finale** $\mathbf{X}_a(t_N)$ produite par le filtre de Kalman,
- et la valeur finale de la trajectoire optimale calculée par la méthode 4DVAR, i.e. $\mathbf{M}_{N,0}\mathbf{X}_a(t_0)$.

On attire l'attention sur le fait que ce ne sont que les valeurs finales qui se confondent et non les trajectoires. La trajectoire du 4DVAR est cependant plus optimale que celle du filtre de Kalman dans la mesure où elle est calculée en tenant compte de l'ensemble des observations de la fenêtre d'assimilation alors que celle du filtre est construite séquentiellement (on ne tient compte que des informations passées et présentes au temps de l'analyse). On montre dans la figure 2.4 un exemple type de trajectoires calculées par les méthodes 3DVAR, 4DVAR et le filtre de Kalman.

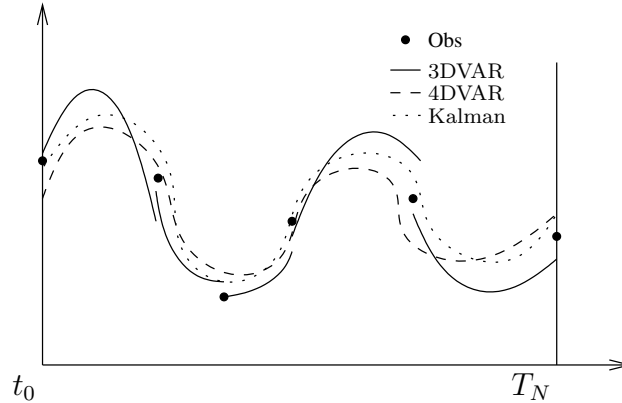


FIG. 2.4. Exemples de trajectoires calculées par les méthodes variationnelles 3DVAR et 4DVAR et le filtre de Kalman

Cette équivalence offre la possibilité de combiner ces deux approches pour pallier les déficiences de l'une et de l'autre [Rab96][Fis98].

2.5.3 Performances

En terme de coût calcul, le 4DVAR est en théorie moins cher que le filtre de Kalman puisqu'il n'y a pas de calcul de matrices à réaliser. Cette assertion est cependant à modérer pour les raisons suivantes :

- Pour une fonction coût fortement non linéaire, la présence de nombreux minima locaux peut rendre la minimisation plus longue et donc plus coûteuse (en nombre d'évaluations de la fonction coût et de son gradient).
- En dehors du cadre linéaire, le calcul du gradient demande le calcul des adjoints des opérateurs d'observation et de dynamique.

En revanche lorsqu'on s'intéresse aux aspects mémoires, les méthodes de type filtre sont moins gourmandes puisque elles n'imposent pas la conservation de l'ensemble des observations de la fenêtre d'assimilation : aussitôt qu'une information est assimilée, elle peut donc être oubliée (mais il reste néanmoins la matrice de gain ainsi que la matrice de covariance d'erreur d'analyse à stocker). Pour le 4DVAR, il est nécessaire de réceptionner l'ensemble des observations (et donc les stocker) avant de produire l'analyse.

2.5.4 Synthèse

De par la grande taille des systèmes requis pour les modèles atmosphériques et la présence par ailleurs de méthodes de minimisation performantes, les méthodes variationnelles dominent la scène des méthodes d'assimilation pour la météorologie. Et bien que de gros efforts aient été faits dans le domaine des filtres pour diminuer leur coût (filtres sous optimaux), il en reste encore à faire pour que ces méthodes soient applicables à des cas réels 3D.

Pour un domaine tel que la physique des réacteurs où les problèmes sont plus petits (on rappelle que les tailles des vecteurs d'analyse et d'observation sont supérieures à 10^6 en météorologie), la conclusion pourrait varier. Un autre point reste à prendre en compte : la disponibilité de l'adjoint des codes. Lorsque le modèle et/ou l'opérateur d'observation sont non linéaires, le 4DVAR et le filtre de Kalman pour les dynamiques non linéaires (EKF) nécessitent l'adjoint des codes correspondants. En physique des réacteurs, cette nécessité est un point bloquant.

2.6 Mise en œuvre des méthodes d'assimilation de données

2.6.1 Modélisation des matrices de covariance d'erreur

La modélisation des matrices de covariance d'erreurs est une étape primordiale puisque la qualité de l'analyse en dépend. On rappelle ci-dessous la définition de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche

$$\mathbf{B} = E[(\epsilon^b - E[\epsilon^b])(\epsilon^b - E[\epsilon^b])^T],$$

ainsi que celle de la matrice de covariance d'erreur d'observation

$$\mathbf{R} = E[(\epsilon^{obs} - E[\epsilon^{obs}])(\epsilon^{obs} - E[\epsilon^{obs}])^T],$$

où ϵ^b et ϵ^{obs} représentent respectivement les erreurs d'ébauche et d'observation et $E[.]$ désigne l'espérance mathématique. On fait très souvent l'hypothèse d'erreurs non biaisées, i.e. :

$$E[\epsilon^b] = E[\epsilon^{obs}] = 0.$$

Les éléments diagonaux de \mathbf{B} et \mathbf{R} correspondent aux variances des vecteurs ϵ^b et ϵ^{obs} et les éléments extra-diagonaux aux corrélations. On exprime souvent la matrice \mathbf{B} sous une forme factorisée : $\mathbf{B} = \mathbf{\Sigma}\mathbf{C}\mathbf{\Sigma}$, où la matrice \mathbf{C} représente les corrélations et $\mathbf{\Sigma}$ la matrice diagonale des écarts-types.

Puisqu'on ne connaît pas l'état vrai, on estime les erreurs d'ébauche et d'observation par une approche statistique : on recherche l'expression des densités de probabilité qui gouvernent les erreurs d'ébauche et d'observation (on fait très souvent l'hypothèse que ces densités sont gaussiennes).

La principale difficulté dans les domaines de la météorologie provient du manque d'information pour déterminer l'ensemble des éléments des matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} (plus de 10^{11} éléments). D'autre part, la taille des matrices impliquées exclut la manipulation de matrices pleines. La matrice \mathbf{B} est alors approximée à l'aide d'un modèle.

2.6.2 Méthode de l'adjoint pour l'assimilation variationnelle

L'assimilation variationnelle se résume à un problème de minimisation qui nécessite très souvent la connaissance du gradient de la fonction coût. Le calcul de ce gradient requiert l'adjoint de l'opérateur d'observation \mathcal{H} et en dynamique l'adjoint de l'opérateur d'évolution \mathcal{M} .

L'adjoint est un opérateur linéaire défini de manière unique par rapport à un autre opérateur linéaire. Soient \mathcal{E} et \mathcal{F} deux espaces de Hilbert \mathcal{F} munis respectivement des produit scalaires $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{E}}$ et $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{F}}$ et \mathbf{L} un opérateur linéaire de \mathcal{E} dans \mathcal{F} . Il existe un unique opérateur linéaire de \mathcal{F} dans \mathcal{E} , noté \mathbf{L}^* et appelé opérateur adjoint de \mathbf{L} qui vérifie :

$$\forall \mathbf{u} \in \mathcal{E}, \forall \mathbf{v} \in \mathcal{F}, \langle \mathbf{v}, \mathbf{L}(\mathbf{u}) \rangle_{\mathcal{F}} = \langle \mathbf{u}, \mathbf{L}^*(\mathbf{v}) \rangle_{\mathcal{E}}.$$

Si on note \mathbf{M} la représentation matricielle de \mathbf{L} dans les bases de \mathcal{E} et \mathcal{F} , alors la représentation matricielle de \mathbf{L}^* noté \mathbf{M}^* est définie par

$$\mathbf{M}^* = \bar{\mathbf{M}}^T,$$

où $\bar{\mathbf{M}}$ désigne le complexe conjugué de \mathbf{M} . Si \mathbf{M} est réelle, alors $\mathbf{M}^* = \mathbf{M}^T$.

Expression du gradient en fonction des adjoints

On développe ci-après les calculs établissant la formule du gradient de la fonction coût de la méthode 4DVAR. On rappelle ci-dessous l'expression de cette fonction coût :

$$\mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})))^T \mathbf{R}_i^{-1}(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}))).$$

Le gradient de \mathcal{J}_{4DVAR} par rapport à \mathbf{X} dans la direction $\dot{\mathbf{X}}$ et noté $\nabla_{\mathbf{X}} \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X})$ est défini par

$$\langle \nabla_{\mathbf{X}} \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}), \dot{\mathbf{X}} \rangle_{\mathcal{E}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X} + \epsilon \dot{\mathbf{X}}) - \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X})}{\epsilon}. \quad (2.6)$$

On effectue un développement à l'ordre 1 autour du point \mathbf{X} des opérateurs non linéaires \mathcal{H} et $\mathcal{M}_{i,0}$:

$$\mathcal{H}(\mathbf{X} + \epsilon \dot{\mathbf{X}}) = \mathcal{H}(\mathbf{X}) + \epsilon \mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \cdot \dot{\mathbf{X}} + O(\epsilon^2), \quad (2.7)$$

$$\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X} + \epsilon \dot{\mathbf{X}}) = \mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}) + \epsilon \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}} \cdot \dot{\mathbf{X}} + O(\epsilon^2). \quad (2.8)$$

Les matrices $\mathbf{H}_{|\mathbf{X}}$ et $\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}}$ sont respectivement les matrices jacobienues de \mathcal{H} et $\mathcal{M}_{i,0}$ tangentes en \mathbf{X} :

$$\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{X}}(\mathbf{X}), \quad (2.9)$$

$$\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}} = \frac{\partial \mathcal{M}_{i,0}}{\partial \mathbf{X}}(\mathbf{X}). \quad (2.10)$$

En introduisant les développements (2.7) et (2.8) dans la relation (2.6) et en utilisant les opérateurs adjoints, on trouve :

$$\langle \nabla_{\mathbf{X}} \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}), \dot{\mathbf{X}} \rangle_{\mathcal{E}} = \langle \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}))), \dot{\mathbf{X}} \rangle_{\mathcal{E}},$$

d'où

$$\nabla \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}) = \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}))).$$

Le calcul des matrices jacobiennes $\mathbf{H}_{|\mathbf{X}}$ et $\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}}$ (ou de leur transposée) peut se faire selon plusieurs techniques :

1. par le calcul symbolique : on possède une description analytique de la fonction à dériver et on applique, à la main ou avec un différentiateur symbolique, les formules de dérivation pour obtenir l'expression analytique des matrices jacobiennes ;
2. par la méthode des différences finies : les dérivées partielles sont estimées en faisant varier très légèrement et successivement chacune des variables de l'opérateur ;
3. par la différentiation du code, à la main ou de manière automatique avec un outil approprié : on utilise le principe de la dérivation des fonctions composées (*chain rule* en anglais) appliqué non plus à une formule mathématique mais à un programme (on dérive successivement les instructions).

La méthode des différences finies est délicate à mettre en œuvre car il faut fixer un pas de différentiation qui doit être suffisamment petit pour avoir une bonne approximation des gradients. Ce n'est pas le cas des deux autres approches qui permettent, aux erreurs d'arrondis près, d'accéder à des dérivées exactes. L'avantage de la différentiation de code sur la différentiation symbolique est qu'elle peut s'appliquer à des fonctions qui ne sont pas représentables analytiquement (fonctions qui calculent des minimums par exemple).

Pour ces raisons, la différentiation de code (à la main ou non) est préférée aux deux autres techniques pour la génération des adjoints dans la mise en œuvre des méthodes d'assimilation variationnelle. On décrit ci-après le principe de la différentiation de code avant de présenter les spécificités des outils de différentiation automatique.

Obtention de l'adjoint par différentiation

On dispose d'un programme P , appelé code *primal*, implémentant une fonction $f : \mathbf{X} \in \mathbb{R}^m \mapsto \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^n$. Les techniques de différentiation ne permettent pas d'accéder directement à la matrice jacobienne de f mais à la valeur de la dérivée en un point donné de \mathbb{R}^n ou \mathbb{R}^m . Il faut donc n ou m évaluations successives du programme dérivé pour obtenir la jacobienne. Par chance, on a plutôt besoin de l'évaluation du produit de la jacobienne et d'un vecteur et dans ce cas il suffit d'une seule évaluation du programme dérivé.

On note respectivement $(e_i)_{i=1..n}$ et $(r_j)_{j=1..m}$ les entrées et les sorties du programme P implémentant la fonction $f : \{e_1, \dots, e_n\} \mapsto \{r_1, \dots, r_m\}$. Le mode "direct" ou "tangent" construit le programme \dot{P}

$$\dot{P} : \{e_1, \dots, e_n, \dot{e}_1, \dots, \dot{e}_n\} \mapsto \{r_1, \dots, r_m, \dot{r}_1, \dots, \dot{r}_m\}$$

qui calcule les variations \dot{r}_j des résultats de P en fonction des entrées e_i et de leurs variations \dot{e}_i . Cela revient en fait à calculer la fonction linéaire "tangente" à f au point $\{e_1, \dots, e_n\}$ et à

l'appliquer au vecteur $\{\dot{e}_1, \dots, \dot{e}_n\}$. Le mode “inverse” génère le programme \bar{P}

$$\bar{P} : \{e_1, \dots, e_n, \bar{r}_1, \dots, \bar{r}_n\} \mapsto \{r_1, \dots, r_m, \bar{e}_1, \dots, \bar{e}_m\}$$

qui calcule pour une certaine variation des résultats \bar{r}_j , la direction de variation \bar{e}_i des entrées qui maximise la variation des résultats. Cela revient alors à calculer le gradient de f .

Dans les deux cas, le calcul des variations est basé sur la décomposition de f en plusieurs fonctions plus simples telles que $f = f_p \circ f_{p-1} \circ \dots \circ f_1$. Le programme P peut ainsi être vu comme une suite d'instructions élémentaires $P = \{I_1, I_2, \dots, I_p\}$. On développe ci-après les étapes de ces deux modes de différentiation.

Différentiation en mode direct La différentiation en mode direct (en anglais *forward mode*) consiste à calculer la quantité $\dot{\mathbf{Y}} = f'(\mathbf{X}) \cdot \dot{\mathbf{X}}$ où $\dot{\mathbf{X}}$ représente une variation de l'entrée \mathbf{X} et $\dot{\mathbf{Y}}$ la sensibilité de la sortie \mathbf{Y} à cette variation $\dot{\mathbf{X}}$. De manière pratique, elle évalue la fonction f et son gradient $f'(\mathbf{X})$ simultanément grâce à la règle de dérivation des fonctions composées.

Soit \mathbf{W} le vecteur contenant l'ensemble des variables utilisées par le code, on note \mathbf{W}_k la valeur prise par \mathbf{W} après l'instruction I_k . On a donc $\mathbf{W}_0 = \mathbf{X}$ et $\mathbf{W}_k = f_k(\mathbf{W}_{k-1})$. La règle de dérivation des fonctions composées donne alors :

$$f'(\mathbf{X}) = f'_p(\mathbf{W}_{p-1}) \cdot f'_{p-1}(\mathbf{W}_{p-2}) \dots f'_1(\mathbf{W}_0).$$

A chaque instruction³ I_k du code qui correspond à une modification de \mathbf{W} , on fait correspondre une instruction I'_k calculant le gradient de cette modification, soit $\nabla f_k(\mathbf{W}_{k-1})$. On peut ainsi évaluer la quantité

$$f'(\mathbf{X}) \cdot \dot{\mathbf{X}} = f'_p(\mathbf{W}_{p-1}) \cdot f'_{p-1}(\mathbf{W}_{p-2}) \dots f'_1(\mathbf{W}_0) \cdot \dot{\mathbf{X}}$$

de la droite vers la gauche en intercalant les instructions I_k avec les instructions dérivées I'_k . On donne ci-après la structure générale d'un programme et de son programme tangent.

$$\left[\begin{array}{l} \mathbf{W} = \mathbf{X} \\ I_1 \\ I_2 \\ \dots \\ I_p \\ \mathbf{Y} = \mathbf{W} \end{array} \right] \longrightarrow \left[\begin{array}{l} \mathbf{W} = \mathbf{X} \\ J = f'_1(\mathbf{W}) \dot{\mathbf{X}} \\ I_1 \\ J = f'_2(\mathbf{W}) * J \\ I_2 \\ \dots \\ J = f'_p(\mathbf{W}) * J \\ I_p \\ \mathbf{Y} = \mathbf{W} \end{array} \right]$$

Exemple pratique On considère le programme simple suivant :

```
x1 = 2 * x1
x2 = 3 * (x2 + 1)
y = x1 * x2
```

Il y a donc deux entrées $x1$ et $x2$ et une seule sortie y . On introduit respectivement une variation $dx1$ et $dx2$ sur $x1$ et $x2$. La variation de y notée dy est calculée de la manière suivante :

³Les instructions du type `if`, `while` ne rentrent pas dans cette catégorie. Leur gestion est problématique car elles introduisent des discontinuités dans le programme.


```

dx1 = 2 * x1d
x1 = 2 * x1
dx2 = 3 * dx2
x2 = 3 * (x2 + 1)
dy = dx1 * x2 + x1 * dx2
y = x1 * x2
    
```

Cet exemple permet de montrer une caractéristique importante du mode direct : il fournit la sortie y en plus de la variation dy . D'autre part la structure du code est préservée : les instructions du type `if`, `while` sont conservées à l'identique.

D'une manière générale, le mode direct est intéressant pour le calcul de la matrice jacobienne lorsque le nombre d'entrées est bien plus faible que le nombre de sorties, i.e. $n \ll m$. Dans le cas contraire, le mode inverse est plus approprié.

Différentiation en mode inverse La différentiation en mode inverse (en anglais *reverse mode*) est un autre jeu de règles permettant de construire les dérivées partielles de la fonction f . Ce mode est à privilégier lorsque $n \gg m$. Il consiste à évaluer la quantité $\bar{\mathbf{X}} = f'^T(\mathbf{X}) \cdot \bar{\mathbf{Y}}$ où $\bar{\mathbf{X}}$ représente la variation des entrées qui entraîne au plus la variation des résultats fixée par $\bar{\mathbf{Y}}$. L'écriture d'un code adjoint est moins intuitive que celle du code tangent. Il s'agit de "dualiser" ligne par ligne les instructions du code primal, dans l'ordre inverse de leur exécution :

$$\bar{\mathbf{X}} = f'^T(\mathbf{X}) \cdot \bar{\mathbf{Y}} = f_1'^T(\mathbf{W}_0) \dots f_{p-1}'^T(\mathbf{W}_{p-2}) \cdot f_p'^T(\mathbf{W}_{p-1}) \cdot \bar{\mathbf{Y}}. \quad (2.11)$$

Cette technique est plus difficile à mettre en œuvre. Pour calculer $f'^T(\mathbf{X}) \cdot \bar{\mathbf{Y}}$, il faut en effet d'abord évaluer l'instruction adjointe de la dernière instruction du code primal et ainsi de suite jusqu'à la première instruction du code primal. Cela requiert donc de connaître \mathbf{W}_{p-1} avant de commencer à calculer le gradient. Deux stratégies sont possibles : on parcourt une première fois le code primal et on stocke l'intégralité des \mathbf{W}_k (*store-all strategy* en anglais, très coûteux en mémoire) puis on parcourt le code adjoint construit selon l'expression donnée en (2.11). Une seconde stratégie consiste à recalculer \mathbf{W}_k en cas de besoin en ré-exécutant toutes les instructions de I_0 à I_k (*recompute-all strategy*, très lourd en temps calcul). La meilleure stratégie est bien entendu un compromis des deux.

La structure générale d'un programme et de son programme adjoint est donc la suivante :

$$\left[\begin{array}{l} I_1 \\ \dots \\ I_{p-2} \\ I_{p-1} \\ I_p \end{array} \right] \longrightarrow \left[\begin{array}{l} I_1 \\ \dots \\ I_{p-2} \\ I_{p-1} \\ \bar{\mathbf{W}} = \mathbf{Y} \\ \bar{\mathbf{W}} = f_p'^T(\mathbf{W}_{p-1}) \bar{\mathbf{W}} \\ \text{restauration de } \mathbf{W}_{p-2} \\ \bar{\mathbf{W}} = f_{p-1}'^T(\mathbf{W}_{p-2}) \bar{\mathbf{W}} \\ \dots \\ \text{restauration de } \mathbf{W}_0 \\ \bar{\mathbf{W}} = f_1'^T(\mathbf{W}_0) \bar{\mathbf{W}} \\ \bar{\mathbf{X}} = \bar{\mathbf{W}} \end{array} \right]$$

Lorsqu'on différencie à la main un code, il est possible de simplifier certaines étapes ; le problème

de la gestion des variables intermédiaires \mathbf{W}_k demeure cependant. En reprenant l'exemple précédent, on voit que le code tangent peut se mettre sous la forme d'un système linéaire :

$$\begin{pmatrix} dx1 \\ dx2 \\ dy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \\ x2 & x1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx1 \\ dx2 \end{pmatrix}$$

On note respectivement $bx1$, $bx2$ et by les variables adjointes de $x1$, $x2$ et y . La matrice adjointe correspondant à la transposée de la matrice tangente, on a donc le système linéaire adjoint suivant :

$$\begin{pmatrix} bx1 \\ bx2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & x2 \\ 0 & 3 & x1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} bx1 \\ bx2 \\ by \end{pmatrix}$$

La transcription de système linéaire en instructions donne le programme adjoint suivant :

```
x1 = 2 * x1
x2 = 3 * (x2+1)
bx1 = 2 * bx1 + x2 * by
bx2 = 3 * bx2 + x1 * by
```

Mais un différentiateur automatique aurait donné le programme équivalent suivant :

```
x1 = 2 * x1
x2 = 3 * (x2+1)
bx1 = x2 * by
bx2 = x1 * by
bx2 = bx2 + 3 * bx2
bx1 = bx1 + 2 * bx1
```

On attire l'attention à travers cet exemple, sur le fait que le programme adjoint ne fournit pas la sortie y en plus des variations $bx1$ et $bx2$. D'autre part il ne respecte pas la structure du code initial en faisant intervenir des instructions dans un ordre inverse et en recalculant des variables intermédiaires : le mode inverse produit donc des codes complexes du point de vue de la lisibilité. Il reste néanmoins avantageux lorsque $n \gg m$. On renvoie aux références [Gil91][Gie98] pour plus de détails sur la différentiation et la construction de codes adjoints.

Les outils de différentiation automatique

Les outils de différentiation automatique génèrent les sources d'un programme P' calculant certaines dérivées de f à partir des sources du programme P . Très souvent, ils ne gèrent qu'un seul type de langage informatique : le langage dans lequel est écrit le code primal peut donc constituer une contrainte forte dans le choix du différentiateur automatique. La plupart de ces outils propose les deux modes de différentiation présentés précédemment. On rencontre de manière beaucoup plus rare le mode "taylor" qui permet d'accéder aux coefficients du développement de Taylor de la fonction f et le mode "jacobienne" qui fournit directement la matrice jacobienne des résultats par rapport aux entrées et évite ainsi d'avoir à exécuter n fois le code direct ou m fois le code inverse pour calculer la matrice jacobienne.

Il existe à l'heure actuelle deux approches pour obtenir P' :

- la surcharge d'opérateur qui consiste à générer un code dérivé partageant la même structure que le code source P en surchargeant les opérateurs arithmétiques : on complète chaque opérateur par l'opérateur dérivé correspondant. Cette technique est plus simple à développer notamment pour les langages objets (le seul outil disponible en C++ est basé sur la surcharge).
- la transformation *source to source* qui consiste à réécrire à partir du code source original P , un autre code calculant la dérivée du code source ; elle est plus difficile à implémenter (il faut lire et analyser le programme original et générer un nouveau code source un peu comme le ferait un compilateur) mais plus performante.

Les outils de différentiation les plus connus sont les suivants :

- ADOL-C [Gri96] est développé par l'université de Dresde (Allemagne) : cet outil gratuit offre les modes directs et adjoints ainsi que le calcul des dérivées d'ordre élevé pour des programmes écrits en C et C++. Il est basé sur l'approche surcharge d'opérateur.
- TAPENADE [Tap04] est développé par l'INRIA de Sophia Antipolis (France) : ce logiciel, également gratuit et successeur de l'outil ODYSSEÉ, offre les modes directs et adjoints de programmes écrits en F77, F90 et F95. Il fait partie des outils "source to source"
- OpenAD/F [Ope][Utk06] est co-développé par le laboratoire d'Argonne (Argonne National Laboratory), le Massachusetts Institute of Technology (MIT) et d'autres universités américaines (mise en commun des outils gratuits Adifor, Adjifor, Adic) : similaire sur l'architecture à l'outil TAPENADE, il s'adresse à des codes écrits en F77, F90, F95 et C.
- TAMC [Gie97] et sa version commerciale TAC sont développés par la compagnie FastOpt en Allemagne : il offre les modes direct et adjoint pour des programmes écrits en F77, F90 et F95 et est basé sur l'approche "source to source".

On renvoie le lecteur au site internet dédié à la différentiation automatique www.autodiff.org pour de plus amples renseignements sur ces outils.

Bien que les outils de différentiation se soient améliorés, on ne peut toujours pas les utiliser en "boîte noire". Il est impératif d'avoir une très bonne maîtrise du code source et de connaître les limites de ces techniques. L'utilisateur doit notamment éviter certains codages, corrects syntaxiquement mais menant à des dérivées fausses (instructions imbriquées du type `ABS(SUM(VECTOR(1 : n)))` en fortran par exemple), voire recoder lui-même certaines parties du code dérivé (routines de librairie du type LAPACK par exemple). Certaines options de compilation peuvent d'autre part introduire des erreurs dans le code généré. On signale cependant qu'il existe des techniques pour valider *a posteriori* les codes générés (voir section 3.3).

En terme de performance du code généré, les outils de différentiation s'en sortent plutôt bien pour le code tangent. Ce n'est généralement pas le cas pour le code adjoint : la gestion des variables intermédiaires et des boucles alourdissent le temps de calcul du code ainsi que sa lisibilité.

Ces éléments montrent la difficulté voire l'impossibilité de recourir aujourd'hui à ces outils pour la différentiation de grands codes industriels déjà développés et mis en service. Les codes de météorologie dont les applications requièrent impérativement les linéaires tangents et les adjoints, ont par exemple été développés avec ces services dès le départ. Ces techniques sont en revanche, tout à fait pertinentes pour du prototypage.

On présente un peu plus en détail, l'outil TAPENADE utilisé pour générer l'adjoint de la maquette CIREP1D présentée dans le chapitre 3.

Présentation de TAPENADE

TAPENADE [Tap04] est un outil de différentiation développé et distribué gratuitement depuis 1999 par le projet TROPICS de l'INRIA de Sophia-Antipolis. C'est le successeur de l'outil de différentiation ODYSÉE [Fau98] précédemment développé à l'INRIA et à l'Université de Nice pendant les années 90. Il propose la génération des codes tangents et adjoints d'un programme source développé en fortran 77, fortran 90 et fortran 95. Il n'est cependant pas compatible avec l'allocation dynamique de mémoire permise à partir du fortran 90. D'autre part, les instructions de type 'GO TO' lui posent des problèmes : il n'est donc pas possible de faire différentier la librairie LAPACK par TAPENADE. TAPENADE accepte en revanche, les "modules" du fortran 90 et 95 et les "common" du fortran 77.

TAPENADE est basé sur l'approche "source to source". Il analyse dans un premier temps la structure du programme à la manière d'un compilateur puis génère un programme dérivé. La gestion des variables intermédiaires \mathbf{W}_k est basée sur un compromis entre les approches *store-all* et *recompute-all* et qui fait appel à la technique du *checkpointing* : on identifie des blocs d'instructions pour lesquels on peut économiser des recalculs et de la mémoire (on ne retient que ce qui est nécessaire pour l'exécution du bloc concerné). Enfin, TAPENADE est développé à 90% en Java.

Par rapport à d'autres outils de différentiation, TAPENADE est très peu intrusif dans le code à différentier : il suffit de changer l'entête du programme principal en une subroutine. Toutefois cela n'exclut pas de possibles redéveloppements de certaines parties du code primal si la première génération de code ne fournit pas un tangent ou un adjoint correct. Des tests de validation *a posteriori* des codes tangents et inverses générés, ainsi qu'un retour d'expérience sur la différentiation avec TAPENADE de la maquette CIREP1D sont donnés en section 3.3.

Deuxième partie

Construction d'un système d'assimilation pour la dynamique xénon

3

CIREP1D, code 1D pour les REP

Le code développé pour les expériences d'assimilation de données de ce mémoire s'appelle CIREP1D. Il permet de simuler en 1D la dynamique du xénon dans un REP (représentation axiale) en fonction de consignes de puissance et d'insertion des grappes de commande, dans un intervalle de temps donné. Ce code répond à deux impératifs :

- disposer d'un code rapide en temps de calcul pour simuler des transitoires longs,
- disposer des codes linéaire tangent et adjoint du modèle pour pouvoir tester aisément des algorithmes de minimisation nécessitant le gradient de la fonction coût du 4DVAR.

Pour ces deux raisons, le recours à des codes déjà existants s'est montré impossible. Les codes développés à EDF permettant de simuler une dynamique xénon sont des codes industriels plutôt 3D que 1D et donc très coûteux en temps calcul pour simuler des transitoires de plusieurs jours. Par ailleurs, ces codes ne possèdent pas d'implémentation du modèle linéaire tangent, ni de l'adjoint. Enfin, les tentatives passées pour les différentier ont échoué (la conclusion en résultant étant qu'il faut prévoir le développement du linéaire tangent et de l'adjoint au moment même du développement du code direct).

Pour modéliser une dynamique xénon, le code CIREP1D intègre un module de neutronique 1D (représentation axiale), un module de thermique du combustible 1D (représentation radiale) et de thermohydraulique 1D (représentation axiale) ainsi qu'un modèle simplifié de contre-réactions neutroniques basé sur des interpolations linéaires (section 3.1). Les calculs menés avec CIREP1D ont été comparés qualitativement aux calculs menés avec le code industriel 3D de référence d'EDF sur des transitoires type (section 3.2) .

La différentiation de CIREP1D par le différentiateur automatique TAPENADE est présenté dans la section suivante. Un retour d'expérience sur la différentiation automatique est proposé. Ce chapitre se termine par quelques simulations de transitoire xénon réalisées avec CIREP1D.

3.1 Description

3.1.1 Principe

CIREP1D est un code 1D de dynamique xénon (représentation axiale), développé dans le cadre de cette thèse (en Fortran 90) et inspiré d'un modèle 1D pour les réacteurs à sels fondus [Lec01]. Il permet de réaliser des simulations de régime permanent et de transitoires lents pour les cœurs de REP. Il nécessite notamment en entrée :

- un profil 1D d'irradiation,
- une bibliothèque neutronique de sections efficaces au format JONAS⁴,
- une consigne de puissance (qui peut varier au cours du temps dans le cas d'un transitoire),
- une position des grappes de commande (qui peut également varier au cours du temps pour une simulation de transitoire),
- et pour un transitoire, un intervalle de temps de simulation avec un pas de temps d'intégration et des conditions initiales.

Le code fournit en sortie :

- les flux neutroniques,
- les champs de puissance linéique dégagée dans le combustible et dans le modérateur,
- les champs de température du combustible et du modérateur,
- les concentrations de xénon et d'iode,

aux nœuds d'un maillage 1D du cœur ainsi que

- la concentration en bore critique (scalaire) à chaque pas de temps d'intégration pour la simulation d'un transitoire.

On donne ci-dessous une brève description des deux types de calculs qui peuvent être menés avec le code CIREP1D :

- Le **régime permanent** correspond à un fonctionnement du réacteur où la puissance et la position des barres sont maintenues constantes pendant plusieurs heures. Dans ce cadre, le xénon et l'iode sont supposés avoir atteint leur valeur à saturation. Les concentrations de xénon et d'iode calculées par CIREP1D sont alors celles à l'équilibre. Les équations de la neutronique, de la thermohydraulique et de la thermique sont résolues également en stationnaire. Pour que ce régime permanent soit possible, il est nécessaire que la production de neutrons soit égale à la disparition des neutrons. Cet équilibre est atteint avec une certaine quantité de bore dilué dans le circuit primaire. Le but d'un calcul en régime permanent est de déterminer cette concentration appelée concentration en bore critique.
- On appelle **transitoire lent**, une dynamique qui ne nécessite pas la résolution en cinétique des équations de neutronique, de thermique et de thermohydraulique. Cela est possible lorsque l'échelle de temps impliquée dans la dynamique est largement supérieure à celle de la mise en équilibre de la neutronique avec la thermique et la thermohydraulique. Un transitoire lent est donc modélisé par une suite de calculs stationnaires où seules quelques quantités varient au cours du temps : on parle d'un régime quasi statique. La dynamique xénon lors d'un suivi de charge (dont l'échelle de temps est l'heure) rentre dans ce cadre-là. Son traitement est détaillé après la description des modèles physiques de CIREP1D.

⁴JONAS est un code de diffusion qui fait partie de la chaîne de génération de bibliothèques neutroniques pour les codes de cœur d'EDF

Pour réaliser ces différents calculs, CIREP1D intègre quatre modules couplés les uns aux autres :

- un module de neutronique 1D,
- un module de thermique du combustible 1D (représentation radiale et non axiale) et thermohydraulique 1D,
- un module xénon 1D,
- un module de contre-réactions neutroniques.

Il n’y a pas de module calculant l’évolution isotopique du combustible compte tenu des courts intervalles de temps considérés (inférieurs à la semaine).

Le contenu de ces modules est détaillé en 3.1.2 et l’enchaînement de ces modules est présenté à la fin de ce paragraphe.

3.1.2 Modélisation physique

Le code CIREP1D est basé sur une modélisation 1D axiale du cœur. Cette modélisation 1D nécessite par rapport à une modélisation 3D, des approximations de la géométrie du cœur et des phénomènes physiques modélisés. Sans description par exemple de la répartition radiale des grappes de commande, il faut estimer l’action collective des grappes de commande, tous groupes confondus. Il n’y a pas non plus de notion d’assemblage, de trou d’eau : dans CIREP1D, une seule bibliothèque de données neutroniques décrit les propriétés du cœur. D’autre part, la perte de la représentation radiale du cœur nécessite la prise en compte des fuites radiales de neutrons sous la forme d’une correction appliquée aux sections d’absorption. En revanche, la traversée du cœur par l’eau du primaire étant très rapide (environ une seconde), le problème de la thermohydraulique du modérateur peut être considéré, en fonctionnement normal, comme un phénomène mono-dimensionnel axial. Pour la thermique du combustible, le problème est différent. L’échauffement du combustible est un phénomène beaucoup plus radial que axial : la température moyenne ne varie axialement que de quelques degrés tandis qu’entre le centre et la surface de la pastille combustible, on relève plus de 300 degrés Celsius d’écart. Il est donc nécessaire de conserver une description radiale de la géométrie du crayon combustible. On néglige cependant la conduction axiale dans le crayon et on suppose qu’il existe une symétrie de révolution : cela permet de rester dans une modélisation 1D radiale de la thermique. Enfin, la neutronique est résolue avec deux groupes d’énergie. Et les contre-réactions quant à elles, ne dépendent pas de la dimension de l’espace.

Discretisation 1D du cœur

La géométrie du cœur 3D est découpée en un ensemble de canaux verticaux qu’on suppose indépendants et pour lesquels la discrétisation est mono-dimensionnelle. Dans CIREP1D, un canal est constitué d’un cylindre d’eau contenant un crayon cylindrique de combustible. En notant N_{ass} le nombre d’assemblages dans le cœur (en pratique 193 pour un REP de type 1300 MWe) et $N_{crayons}$ le nombre de crayons par assemblage (264), le cœur compte ainsi $N_{canaux} = N_{ass} \times N_{crayons}$, soit 50952 canaux pour un REP de type 1300 MWe. On ne modélise qu’un seul canal moyen supposé être représentatif des phénomènes physiques se déroulant dans le cœur.

Le canal est découpé axialement en $N_{cœur}$ mailles. On définit les variables suivantes :

- la température modérateur T_{mod} ,
- le flux à deux groupes d’énergie $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2)$ (dans la suite, l’indice g fait référence au groupe d’énergie),

- la puissance dégagée dans le modérateur P_{mod} ,
- les concentrations de xénon C_{Xe} et d'iode C_I .

Elles sont discrétisées aux nœuds de ce maillage 1D du canal. Pour les raisons évoquées précédemment, la variable de température combustible est discrétisée sur un maillage 2D : on fait l'hypothèse d'une symétrie de révolution qui permet d'utiliser une représentation 2D du crayon combustible. Pour la variable température combustible, le crayon est donc découpé radialement en N_{crayon} anneaux et axialement en N_{coeur} mailles. La température combustible est donc connue aux nœuds de ces éléments de discrétisation. Ces éléments de discrétisation sont repris dans la figure 3.1.

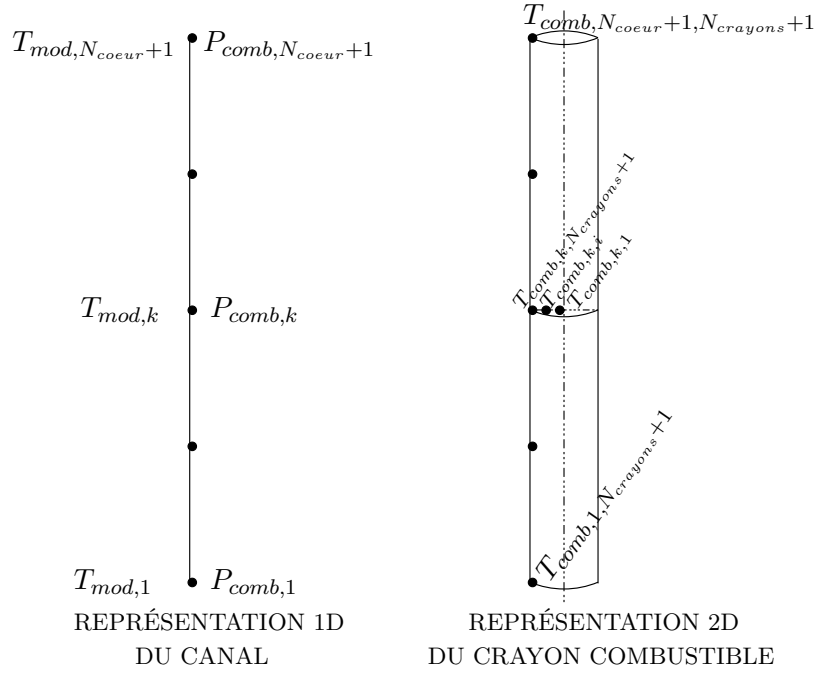


FIG. 3.1. Discretisation du canal et du crayon combustible : seule la température combustible est discrétisée sur un maillage 2D du crayon ; les autres variables sont discrétisées aux nœuds du maillage 1D du canal.

Neutronique

Le module de neutronique de CIREP1D a pour but le calcul de la répartition spatiale des neutrons dans le réacteur 1D et donc le calcul de la puissance linéique dégagée à la fois dans le combustible et dans le modérateur.

Il s'appuie sur un modèle de diffusion 1D à deux groupes d'énergie. On rappelle que la théorie de la diffusion, approximation du transport, est valable si la structure du réacteur n'est pas trop hétérogène et si l'absorption est faible devant la diffusion, i.e. si les neutrons parcourent plusieurs longueurs de diffusion avant d'être absorbés par le milieu. Les fuites radiales sont prises en compte par une correction sur les sections d'absorption des deux groupes : $\Sigma_{ag} + D_g B^2$. Le coefficient B^2 exprimé en cm^{-2} est appelé laplacien radial et ne dépend pas du groupe considéré (c'est une donnée de la bibliothèque neutronique).

Équations : On donne ci-dessous l'équation de la diffusion cinétique 1D prenant en compte les neutrons retardés. Ceux-ci sont issus de la décroissance radioactive de certains produits de fission, appelés précurseurs et sont généralement regroupés en 6 familles suivant leur période de décroissance. On adopte les notations simplifiées $\partial_z = \frac{\partial}{\partial z}$ et $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{v_1} \partial_t \Phi_1(z, t) = \partial_z D_1(z) \partial_z \Phi_1(z, t) + (1 - \beta) [\nu_1 \Sigma_{f1}(z) \Phi_1(z) + \nu_2 \Sigma_{f2}(z) \Phi_2(z, t)] \\ \quad - [\Sigma_{a1}(z) + \Sigma_r(z) + D_1 B^2(z)] \Phi_1(z, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(z, t), \\ \frac{1}{v_2} \partial_t \Phi_2(z, t) = \partial_z D_2(z) \partial_z \Phi_2(z, t) - (\Sigma_{a2}(z) + D_2 B^2(z)) \Phi_2(z, t) + \Sigma_r(z) \Phi_1(z, t), \\ \partial_t C_i(z, t) = \beta_i [\nu_1 \Sigma_{f1}(z) \Phi_1(z, t) + \nu_2 \Sigma_{f2}(z) \Phi_2(z, t)] - \lambda_i C_i(z, t) \text{ pour } i = 1..6, \end{array} \right. \quad (3.1)$$

où

- Φ_1 et Φ_2 sont respectivement les flux rapide (groupe 1) et thermique (groupe 2) (unité $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$);
- v_1 et v_2 sont les vitesses des groupes rapide et thermique (unité $\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$);
- D_g est le coefficient de diffusion du groupe g (unité cm);
- Σ_{ag} est la section efficace d'absorption du groupe g (unité cm^{-1});
- Σ_r est la section de scattering du groupe rapide vers le groupe thermique (section de ralentissement) (unité cm^{-1});
- $\nu_g \Sigma_{fg}$ est la section de production du groupe g (unité cm^{-1});
- C_i est la concentration du $i^{\text{ème}}$ groupe de précurseurs (unité cm^{-3});
- v_g est la vitesse moyenne des neutrons du groupe g (unité $\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$);
- λ_i est la constante de décroissance des précurseurs du groupe i (unité s^{-1});
- β_i est la fraction des précurseurs du groupe i créés par les fissions (sans unité);
- enfin β est défini par $\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i$ (sans unité).

Ces différents termes neutroniques ont été introduits à la section 1.2.

L'équation (3.1) permet de modéliser des transitoires rapides. Dans le cadre de l'étude de la dynamique xénon qui constitue un transitoire lent, il est possible de modéliser la neutronique en stationnaire : on considère que la neutronique se remet instantanément à l'équilibre après un changement de puissance et de position des grappes de commande. Bien que les deux modèles de diffusion (stationnaire et cinétique) soient implémentés dans CIREP1D, on ne détaille ici que le régime stationnaire, suffisant pour l'étude des transitoires xénon.

L'hypothèse du régime stationnaire implique qu'à tout instant la production des neutrons est équilibrée par la disparition des neutrons. Les équations de diffusion sont donc établies en supprimant la dépendance temporelle dans le système (3.1) et en ajustant la production des neutrons à l'aide d'un paramètre k . En stationnaire, le terme des précurseurs dans l'équation du premier groupe n'est plus pris en compte.

$$\left\{ \begin{array}{l} -\partial_z D_1(z) \partial_z \Phi_1(z) + [\Sigma_{a1}(z) + \Sigma_r(z) + D_1(z) B^2] \Phi_1(z) = \frac{1}{k} \nu \Sigma_f(z) \Phi(z) \\ -\partial_z D_2(z) \partial_z \Phi_2(z) + [\Sigma_{a2}(z) + D_2(z) B^2] \Phi_2(z) - \Sigma_r(z) \Phi_1(z) = 0 \\ \lambda_i C_i = \beta_i \nu \Sigma_f(z) \Phi(z) \text{ pour } i = 1..6 \end{array} \right. \quad (3.2)$$

avec $\nu \Sigma_f(z) \Phi(z) = \nu_1 \Sigma_{f1} \Phi_1(z) + \nu_2 \Sigma_{f2} \Phi_2(z)$. Le paramètre k correspond au facteur multiplicatif déjà rencontré précédemment. Le régime stationnaire est donc obtenu en ajustant la

concentration du bore de sorte que $k = 1$. On rappelle que le bore est un poison neutronique dissous dans le circuit primaire et qu'il intervient dans le calcul des constantes neutroniques telles que D_1 ou Σ_{a2} .

A ce système d'équations, il convient d'ajouter des conditions aux limites et donc de définir le bord du domaine. En neutronique, on distingue la partie dite active du cœur qui contient le combustible, de la partie non-active qu'on appelle réflecteur. Le réflecteur est en fait un milieu très hétérogène constitué d'eau borée (celle qui circule dans le cœur) et de structures métalliques. Il a pour rôle de renvoyer une partie des neutrons qui s'échappent de la partie active (d'où le nom de réflecteur) afin d'améliorer le facteur de multiplication. Il existe 3 réflecteurs : le réflecteur radial, et les réflecteurs supérieur et inférieur qui se situent respectivement au dessus et en dessous des assemblages. La prise en compte de ces réflecteurs dans la modélisation du cœur peut se faire de deux façons :

- en les maillant et en leur attribuant des propriétés neutroniques spécifiques par rapport à la partie active (pas de combustible donc pas de production de neutrons notamment). Dans ce cas, le bord du domaine Γ est défini par l'interface entre les réflecteurs et la cuve et l'on pose une condition de flux nul au bord :

$$\Phi_g = 0 \text{ sur } \Gamma.$$

- en modélisant le rôle du réflecteur par des conditions aux limites de type Robin (appelées conditions d'albédo en neutronique) :

$$\Phi_g + 3D_g\xi_g\frac{\partial\Phi_g}{\partial n} = 0 \text{ sur } \Gamma.$$

où le bord du domaine Γ est alors défini par l'interface entre la partie active, le réflecteur et n est la normale à l'interface. Le paramètre ξ_g est une longueur d'extrapolation : il représente la distance entre le bord du cœur actif et le point où s'annule la tangente du flux prise à l'interface combustible (voir figure 3.2).

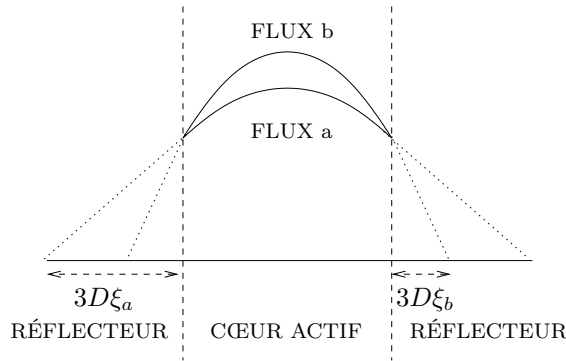


FIG. 3.2. Influence du réflecteur radial sur la forme du flux dans la partie active du cœur.

Dans le cadre de la modélisation 1D axiale, il n'y a pas de réflecteur radial à modéliser. Les termes de fuites radiales sont cependant pris en compte à travers un terme correctif sur les sections d'absorption. Pour les réflecteurs axiaux inférieur et supérieur, on a choisi de poser une condition de flux nul au bord. Cela nécessite donc l'introduction de deux zones réflecteurs dans la géométrie 1D du canal. De manière pratique, la modélisation d'une vingtaine de centimètres

de réflecteur en haut et en bas de la partie active suffisent. Les constantes neutroniques de ce milieu ne sont pas calculées à partir de la bibliothèque neutronique. Elles sont données par l'utilisateur et ne sont pas contre-réactionnées. On donne dans le tableau 3.1 les valeurs prises par défaut des constantes neutroniques dans le réflecteur.

$D_1 = 1.4 \text{ cm}$	$\Sigma_{a1} = 0.10171 \text{ cm}^{-1}$
$D_2 = 0.4 \text{ cm}$	$\Sigma_{a2} = 0.817379 \text{ cm}^{-1}$

TAB. 3.1. Valeurs par défaut des constantes neutroniques pour le milieu réflecteur (les autres constantes neutroniques sont mises à zéro).

En ce qui concerne la condition aux limites pour les précurseurs de neutrons, il vient naturellement

$$\forall i = 1..6, C_i = 0 \text{ sur } \Gamma.$$

Résolution : En régime stationnaire, le problème de neutronique est donc un problème aux valeurs propres : rechercher la plus grande valeur propre tel que le couple $(k, \Phi = (\Phi_1, \Phi_2))$ soit solution de $A\Phi = \frac{1}{k}F\Phi$ où A représente l'opérateur de disparition et F l'opérateur de production de (3.2) :

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ -\Sigma_r & A_2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad F = \begin{pmatrix} \nu_1 \Sigma_{f1} & \nu_2 \Sigma_{f2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

avec

$$A_1 = (-\partial_z D_1 \partial_z) (\cdot) + (\Sigma_{a1} + \Sigma_r + D_1 B^2) (\cdot), \quad A_2 = (-\partial_z D_2 \partial_z) (\cdot) + (\Sigma_{a2} + D_2 B^2) (\cdot).$$

Ce problème aux valeurs propres est résolu par l'algorithme de la puissance inverse qui permet de déterminer la plus petite valeur propre d'une matrice à coefficients réels, et son vecteur propre associé. Il consiste à construire une suite de vecteurs $(\Phi_1^i, \Phi_2^i)_i$, convergeant vers le vecteur propre recherché. On donne ci-dessous une itération de cet algorithme :

1. $\Phi_1^{i+1} = \frac{1}{k^i} A_1^{-1} \cdot (\nu_1 \Sigma_{f1} \Phi_1^i + \nu_2 \Sigma_{f2} \Phi_2^i)$
2. $\Phi_2^{i+1} = A_2^{-1} \cdot \Sigma_r \Phi_1^{i+1}$
3. $\Psi^{i+1} = (\nu_1 \Sigma_{f1} \Phi_1^{i+1} + \nu_2 \Sigma_{f2} \Phi_2^{i+1})$
4. $k^{i+1} = k^i < \Psi^{i+1}, \Psi^{i+1} > / < \Psi^{i+1}, \Psi^i >$

Le critère d'arrêt de l'algorithme est basé à la fois sur le flux et sur la valeur propre.

Les étapes 1 et 2 nécessitent la discrétisation et l'inversion des opérateurs A_1 et A_2 . Dans CIREP1D, ces opérateurs sont discrétisés par un schéma aux différences finies. Les systèmes linéaires issus de cette discrétisation étant de petite taille (une trentaine de degrés de liberté) sont inversés par une méthode de pivot.

Les flux rapide et thermique Φ_1 et Φ_2 étant des vecteurs propres du problème (3.2), ceux-ci sont connus à une constante multiplicative près. Ils sont définis de manière unique en étant normalisés à la puissance totale demandée.

Calcul de puissances : La puissance totale dégagée (en W) s'obtient à partir des flux :

$$p = N_{ass} \times \mathcal{A}_{ass} \times \int_{z=0}^{z=H} [\kappa_1 \Sigma_{f1} \Phi_1(z) + \kappa_2 \Sigma_{f2} \Phi_2(z)] dz,$$

où les paramètres $\kappa_1 \Sigma_{f1}$ et $\kappa_2 \Sigma_{f2}$ exprimés en J.cm^{-1} sont les énergies libérées par fission, H la hauteur active du cœur en cm, N_{ass} le nombre d'assemblages (193 pour un 1300 MW) et \mathcal{A}_{ass} la section de l'assemblage ($21.504 \times 21.504 \text{ cm}^2$). Les flux normalisés exprimés en $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ sont alors donnés par :

$$\bar{\Phi}_g(z) = \frac{P}{p} \Phi_g(z),$$

où P représente la puissance totale demandée en W.

Les puissances linéiques en W.m^{-1} dégagées dans le combustible et le modérateur, calculées par le module de neutronique, s'obtiennent alors par :

$$P_{comb}^{lin,coeur}(z) = 100 \alpha_{puiss} N_{ass} \times \mathcal{A}_{ass} (\kappa_1 \Sigma_{f1} \bar{\Phi}_1(z) + \kappa_2 \Sigma_{f2} \bar{\Phi}_2(z)),$$

$$P_{mod}^{lin,coeur}(z) = 100 (1 - \alpha_{puiss}) N_{ass} \times \mathcal{A}_{ass} (\kappa_1 \Sigma_{f1} \bar{\Phi}_1(z) + \kappa_2 \Sigma_{f2} \bar{\Phi}_2(z)),$$

avec α_{puiss} , la fraction de puissance dégagée directement dans le combustible (0.974 par défaut) et $1 - \alpha_{puiss}$, la fraction de puissance dégagée dans l'eau. La multiplication par le réel 100 permet de passer des centimètres (unité de référence pour la neutronique) aux mètres (unité de référence pour la thermique et la thermohydraulique).

Ces puissances linéiques étant données pour le cœur tout entier, il faut à présent diviser ces puissances par le nombre de canaux pour connaître les puissances linéiques *par canal* utilisées dans le module de thermique et thermohydraulique.

$$P_{comb}^{lin}(z) = P_{comb}^{lin,coeur}(z) / N_{canaux},$$

$$P_{mod}^{lin}(z) = P_{mod}^{lin,coeur}(z) / N_{canaux}.$$

Thermique du combustible et thermohydraulique du modérateur

Le module de thermique et de thermohydraulique calcule la distribution axiale de la température de l'eau ainsi que la distribution radiale et axiale de la température du crayon combustible.

L'eau récupère la chaleur dégagée par les fissions au sein du combustible, essentiellement par convection (une faible part provient des rayonnements). Le couplage entre la thermique du combustible et la thermohydraulique s'exprime donc par des conditions aux limites.

Thermohydraulique : L'eau du circuit primaire pénètre à une certaine température $T_{in,coeur}$ dans le cœur et va circuler avec une vitesse massique G supposée ici constante, le long du combustible de bas en haut en s'échauffant à son contact. On modélise cet échange de chaleur en faisant intervenir un terme flux thermique Φ_{th} dans le bilan enthalpique. On suppose de plus dans ce bilan qu'une fraction $(1 - \alpha_{puiss})$ de puissance volumique est directement dégagée dans le fluide par rayonnement (terme q_{mod}).

Le bilan enthalpique pour l'eau s'écrit donc :

$$\partial_t H_{mod}(z, t) + \frac{G}{\rho_{mod}(H_{mod})} \partial_z H_{mod}(z) = \frac{1}{\rho_{mod}(H_{mod})} \left[\frac{P_{ch}}{A} \Phi_{th}(z) + q_{mod}(z) \right],$$

et en utilisant la relation entre l'enthalpie et la température $\partial H = C_p \partial T$, on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{p,mod}(T_{mod}) \partial_t T_{mod}(z, t) + \frac{G}{\rho_{mod}(T_{mod})} C_{p,mod}(T_{mod}) \partial_z T_{mod}(z, t) \\ \quad = \frac{1}{\rho_{mod}(T_{mod})} \left[\frac{P_{ch}}{A} \Phi_{th}(z, t) + q_{mod}(z, t) \right], \\ \text{condition aux limites : } T_{mod}(z = 0, t) = T_{in,coeur}, \\ \text{condition initiale : } T_{mod}(z, t = 0) = T^0(z). \end{array} \right.$$

où :

G est la vitesse massique exprimée en $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ constante en z dans un canal;

$C_{p,mod}$ est la capacité calorifique du modérateur en $\text{J.kg}^{-1}.\text{C}^{-1}$;

ρ_{mod} représente la masse volumique du fluide en kg.m^{-3} ;

P_{ch} désigne le périmètre chauffant : $P_{ch} = 2\pi r_{comb}$ en m où r_{comb} est le rayon du crayon combustible (gaine comprise) ;

A est la section de passage exprimée en m^2 pour un canal et constante selon z ;

Φ_{th} est le flux thermique en W.m^{-2} à l'interface combustible/modérateur et est donné en statique par la formule $\Phi_{th} = \frac{P_{comb}^{lin}}{P_{ch}}$;

q_{mod} est la fraction de puissance volumique en W.m^{-3} dégagée directement dans l'eau $q_{mod} = \frac{P_{mod}^{lin}}{A}$ (ce terme comprend l'interaction γ -eau et le ralentissement des neutrons dans l'eau) ;

$T_{in,coeur}$ est la température de l'eau en entrée en $^{\circ}\text{C}$;

$T^0(z)$ est la température de l'eau au temps initial en $^{\circ}\text{C}$.

On préfère utiliser le débit volumique Q dans le canal, exprimé en $\text{m}^3.\text{s}^{-1}$:

$$\frac{G}{\rho_{mod}} = \frac{Q}{A}. \quad (3.3)$$

L'équation précédente s'écrit alors :

$$A \partial_t T_{mod}(z, t) + Q \partial_z T_{mod}(z, t) = \frac{1}{\rho_{mod}(T_{mod}) C_{p,mod}(T_{mod})} \left[P_{comb}^{lin}(z, t) + P_{mod}^{lin}(z, t) \right].$$

Pour les simulations menées ultérieurement, seule l'équation stationnaire de thermohydraulique est nécessaire. Elle est donnée par

$$Q \partial_z T_{mod}(z, t) = \frac{1}{\rho_{mod}(T_{mod}) C_{p,mod}(T_{mod})} \left[P_{comb}^{lin}(z, t) + P_{mod}^{lin}(z, t) \right]. \quad (3.4)$$

Du fait de la dépendance des paramètres ρ_{mod} et $C_{p,mod}$ à la température T_{mod} , cette équation est non linéaire. Il est important d'évaluer ces paramètres aux bonnes températures puisque leurs valeurs peuvent presque doubler dans la plage de variation des températures. La résolution de l'équation (3.4) passe donc par la mise en place d'un schéma itératif bouclant sur l'évaluation des constantes et la résolution du système linéaire jusqu'à stabilisation du champ de température. Ce schéma itératif est couplé à celui de la thermique du combustible.

Comme pour le module de neutronique, le schéma de discrétisation est un schéma aux différences finies (schéma centré) appliqué sur le maillage 1D du canal. Le système matriciel issu de cette discrétisation est résolu par une méthode directe avec une factorisation LU de la matrice du système.

Thermique du combustible : Le module de thermique permet de traiter l'équation de la chaleur dans un crayon combustible supposé cylindrique et non déformable. La conduction axiale dans les crayons est négligée. Le calcul de la température combustible en chaque nœud z_i est donc indépendant des autres nœuds de la discrétisation axiale. On fait également l'hypothèse d'une symétrie de révolution. On résout donc l'équation de la chaleur radialement en 1D pour chaque nœud axial z_i .

La géométrie réelle d'un canal contenant le crayon entouré d'eau est de section carrée. Dans le code CIREP1D, le canal est cylindrisé (mais on conserve les volumes d'eau). On ne discrétise pas l'ensemble pastille combustible, gap⁵ et gaine du crayon, mais seulement la pastille.

On présente, dans la figure 3.3, la discrétisation radiale du crayon combustible.

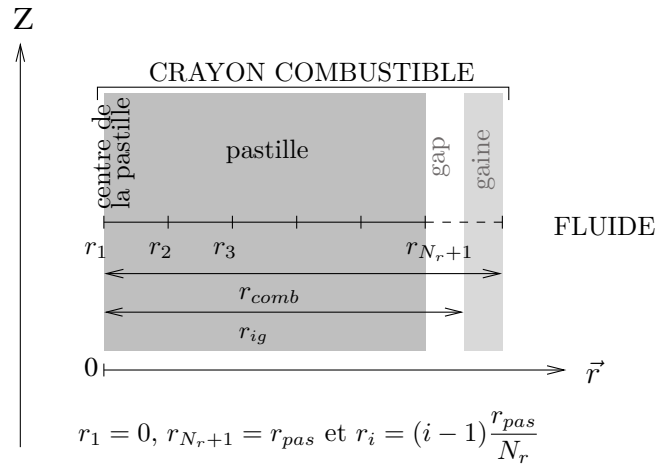


FIG. 3.3. Discrétisation radiale régulière de la pastille combustible. Le gap et la gaine ne sont pas discrétisés dans le code CIREP1D.

La pastille combustible de rayon r_{pas} est discrétisée en N_r couronnes de rayon $r_i = (i - 1) \frac{r_{pas}}{N_r} = (i - 1) \Delta_r$. De par l'hypothèse de symétrie de révolution, on ne modélise la pastille que de $r = 0$ à $r = r_{pas}$. On pose comme condition aux limites au centre du crayon une dérivée nulle de température. Les échanges entre l'eau et le combustible se font par convection via le paramètre d'échange h_{tot} . On néglige enfin la diffusion de chaleur selon l'axe z dans le combustible et l'eau.

L'équation régissant la température au sein du combustible est modélisé par l'équation classique issue d'une équation de conservation de l'énergie pour un système matériel fixe et indéfor-

⁵Le gap est un espace laissé libre à la fabrication entre la gaine et le crayon combustible afin de permettre en particulier une dilatation du combustible

mable, et de la loi de Fourier. En coordonnées cylindriques, elle s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{comb} C_{p,comb}(T_{comb}) \partial_t T_{comb}(r, z, t) = \frac{1}{r} \lambda_{comb}(T_{comb}) \partial_r T_{comb}(r, z, t) \\ \quad + \lambda_{comb}(T_{comb}) \partial_{r^2} T_{comb}(r, z, t) + q_{comb}(z, t) \\ \text{conditions aux limites :} \\ \partial_r T_{comb}(r = 0, z) = 0, \\ T_{comb}(r = r_{pas}, z) = T_{mod}(z) + \frac{\Phi_{th}(r=r_{pas}, z)}{h_{tot}(z)}, \end{array} \right.$$

où :

$C_{p,comb}$ est la capacité calorifique du combustible en $\text{J.kg}^{-1}.\text{C}^{-1}$;

ρ_{comb} représente la masse volumique du combustible en kg.m^{-3} ;

λ_{comb} désigne la conductivité thermique du combustible, exprimée en $\text{W.m}^{-1}.\text{C}^{-1}$;

Φ_{th} est le flux thermique en W.m^{-2} à l'interface combustible/fluide ;

q_{comb} représente la puissance volumique dégagée dans le combustible donnée en W.m^{-3} :

$$q_{comb}(z) = \frac{P_{comb}^{lin}(z)}{\pi(r_{pas})^2} ;$$

h_{tot} est le coefficient d'échange thermique entre la pastille et le fluide en $\text{W.m}^{-2}.\text{C}^{-1}$.

Pour l'étude des transitoires xénon, la version stationnaire de cette équation suffit. Elle est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{1}{r} \lambda_{comb}(T_{comb}) \partial_r T_{comb}(r, z) - \lambda_{comb}(T_{comb}) \partial_{r^2} T_{comb}(r, z) = q_{comb}(z), \\ \text{conditions aux limites :} \\ \partial_r T_{comb}(r = 0, z) = 0, \\ T_{comb}(r = r_{pas}, z) = T_{mod}(z) + \frac{\Phi_{th}(r = r_{pas}, z)}{h_{tot}(z)}. \end{array} \right. \quad (3.5)$$

En stationnaire, on considère que l'élévation de température en un point du crayon est instantanément diffusée à l'ensemble des autres points. Le flux thermique est dans ce cas directement lié à la puissance dégagée dans le crayon combustible par la relation

$$\phi_{th}(r = r_{pas}, t) = \frac{P_{comb}^{lin}(t)}{2\pi r_{pas}}$$

qu'on peut donc introduire dans l'équation (3.5). Cette approche n'est plus possible en instationnaire.

Le schéma de discrétisation est un schéma aux différences finies centré. Le système matriciel issu de cette discrétisation est résolu par une méthode directe avec une factorisation LU de la matrice du système.

Paramètres de thermique et thermohydraulique : La résolution des équations (3.4) et (3.5) nécessite la connaissance des paramètres suivants :

- $C_{p,mod}$, la capacité calorifique du modérateur,
- ρ_{mod} , la densité volumique du modérateur,
- λ_{comb} , la conductivité thermique du combustible,
- h_{tot} , le coefficient d'échange thermique,
- Q , le débit volumique par canal.

Dans les codes industriels disponibles à EDF, les paramètres $C_{p,mod}$ et ρ_{mod} sont estimés à partir d'un module externe qui réalise des interpolations directement dans les tables de l'eau⁶. L'introduction de ce module dans CIREP1D est contradictoire avec la volonté de pouvoir différencier automatiquement le code. Ces deux paramètres sont donc estimés par deux fonctions polynomiales (polynômes de Lagrange) recalées sur quatre couples (température, paramètre) représentatifs de la plage de fonctionnement (voir figure 3.4).

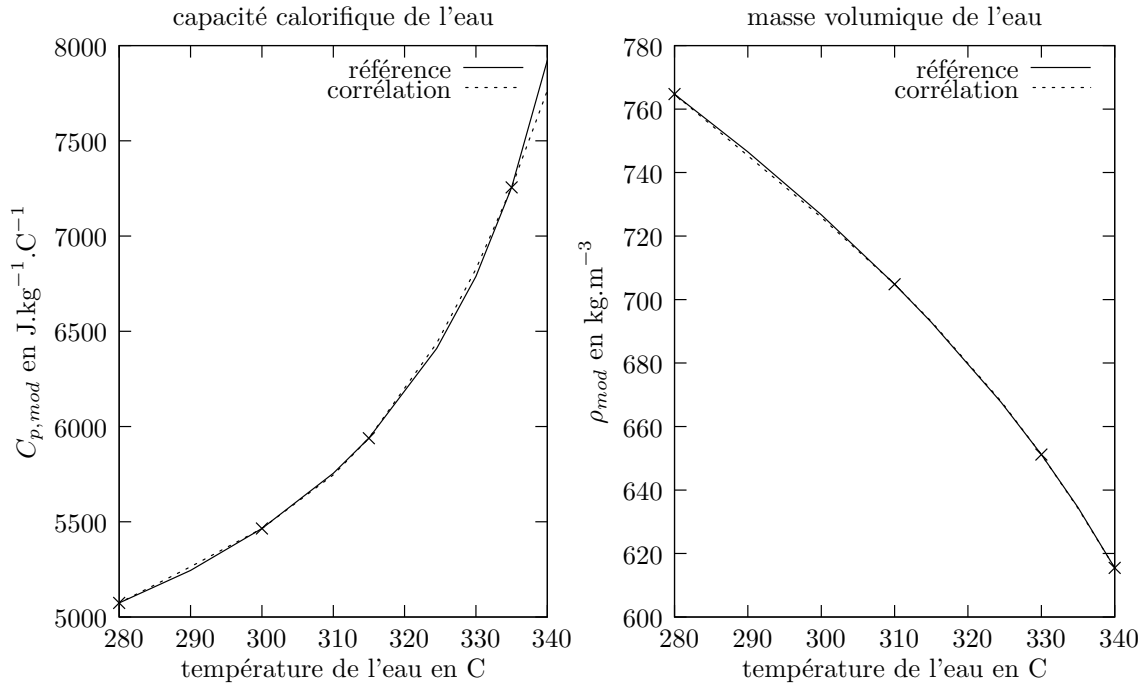


FIG. 3.4. Approximation des paramètres $C_{p,mod}$ et ρ_{mod} par des corrélations. La pression est de 155 bar.

La conductivité thermique λ_{comb} est estimée par la corrélation de Stora-Chenebault (avec correction de Loeb et Ross) utilisée par défaut dans COCCINELLE, le code industriel de référence d'EDF [Pet03] :

$$\lambda_{comb}(\rho, T) = \lambda_{comb}(\rho_{ref}, T) \frac{1 - 0.05 A(T)}{1 - 0.034 A(T)},$$

où

$$A(T) = 2.58 - 0.58 \times 10^{-3} T, \quad \text{pour } T \leq 1000^\circ\text{C},$$

⁶ Les tables de l'eau donnent les caractéristiques physiques de l'eau comme sa masse volumique, en fonction de la température et de la pression ambiantes

et

$$\lambda_{comb}(\rho_{ref}, T) = 5.8915 - 4.3554 \times 10^{-3} T + 1.3324 \times 10^{-6} T.$$

Le coefficient d'échange thermique combustible/fluide h_{tot} est calculé à partir des coefficients d'échange thermique intermédiaires h_{gap} (interface pastille/gap) et h_{conv} (interface gaine/fluide) (voir figure 3.1 pour la signification de ces interfaces) :

$$\frac{1}{h_{tot}} = \frac{1}{h_{gap}} + \frac{2r_{pas}}{r_{pas} + r_{eg}} \frac{e_{gaine}}{\lambda_{gaine}} + \frac{r_{pas}}{r_{comb}} \frac{1}{h_{conv}},$$

avec

- λ_{gaine} , la conductivité thermique de la gaine (en $\text{W.m}^{-1}.\text{C}^{-1}$) calculée en fonction de la température T en $^{\circ}\text{C}$: $\lambda_{gaine}(T) = 12 + 0.0125 T$.
- r_{eg} , le rayon extérieur de la gaine (4.75 mm).
- e_{gaine} , l'épaisseur de la gaine (0.57 mm).
- h_{conv} , le coefficient d'échange thermique à l'interface gaine/fluide ($39239.7 \text{ W.m}^{-1}.\text{C}^{-1}$)

Le coefficient d'échange thermique h_{gap} est estimé grâce à une corrélation recalée sur des valeurs de référence (même procédé que pour les paramètres ρ_{mod} et $C_{p,mod}$).

Résolution du couplage thermique/thermohydraulique : On a vu que du fait de la dépendance des grandeurs de la thermique et de la thermohydraulique aux températures combustible et modérateur, les équations (3.4) et (3.5) sont non linéaires (et couplées). La résolution de ce système couplé est basée sur un schéma itératif.

On note respectivement M^m et M^c les matrices issues de la discrétisation des équations de la thermohydraulique du modérateur et de la thermique du combustible et S^m et S^c les seconds membres correspondants. Si on désigne par $[x]$, la dépendance à la variable x , les systèmes linéaires issus de la discrétisation de (3.4) et (3.5) de thermohydraulique et thermique sont de la forme :

$$\begin{cases} M^m T_{mod} = S_{[T_{mod}]}^m, \\ M^c T_{comb} = S_{[T_{comb}, T_{mod}]}^c. \end{cases}$$

Dans le code CIREP1D, ce système est résolu à l'aide du schéma itératif suivant :

- $M^m T_{mod}^{i+1} = S_{[T_{mod}^i]}^m$
- $M_{[T_{comb}^i]}^c T_{comb}^{i+1} = S_{[T_{comb}^i, T_{mod}^{i+1}]}^c$

jusqu'à obtenir la convergence des températures.

Calcul de la température moyenne du combustible : Pour les contre-réactions, il est nécessaire d'avoir une température combustible moyennée radialement pour chaque maille axiale du canal. Cette température est une température effective, définie par la formule de Rowlands :

$$T_{comb}^{eff}(z) = \frac{4}{9} T_{comb}^{centre}(z) + \frac{5}{9} T_{comb}^{surface}(z),$$

où $T_{comb}^{centre}(z)$ et $T_{comb}^{surface}(z)$ désignent respectivement la température au centre et à la surface du combustible pour la cote z .

Dynamique xénon

La dynamique couplée iode/xénon a été présentée dans le chapitre introductif 1. On rappelle que le xénon est un produit de fission qui apparaît principalement par désintégration β d'un autre produit de fission, l'iode 135 (voir le schéma simplifié de formation du xénon 135, figure 1.6, page 24). Les équations 1D de la dynamique du xénon et de l'iode s'écrivent :

$$\begin{cases} \frac{\partial C_I}{\partial t}(z, t) = \gamma_I \Sigma_f(z, t) \Phi(z, t) - \lambda_I C_I(z, t), \\ \frac{\partial C_{Xe}}{\partial t}(z, t) = \gamma_{Xe} \Sigma_f(z, t) \Phi(z, t) + \lambda_I C_I(z, t) - (\lambda_{Xe} + \sigma_{Xe}(z, t) \Phi(z, t)) C_{Xe}(z, t). \end{cases} \quad (3.6)$$

avec

- C_I et C_{Xe} , la concentration de l'iode 135 et du xénon 135 en cm^{-3} ,
- λ_I et λ_{Xe} , les constantes de décroissance radioactive en s^{-1} ,
- γ_I et γ_{Xe} , les rendements de fission de l'iode 135 et du xénon 135,
- $\Sigma_f \Phi = \Sigma_{f1} \Phi_1 + \Sigma_{f2} \Phi_2$, le taux de réaction de fission en $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$,
- $C_{Xe} \sigma_{Xe} \Phi$, le taux de réaction d'absorption dans le xénon en $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

Ces équations sont résolues par un schéma d'Euler implicite en temps.

Lorsqu'on réalise un calcul en régime permanent, on suppose que l'iode et le xénon ont atteint leur valeur à l'équilibre. Ces valeurs sont données explicitement par les formules suivantes :

$$\begin{cases} C_I^{eq}(z) = \frac{\gamma_I \Sigma_f(z) \Phi(z)}{\lambda_I}, \\ C_{Xe}^{eq}(z) = \frac{(\gamma_I + \gamma_{Xe}) \Sigma_f(z) \Phi(z)}{\lambda_{Xe} + \sigma_{Xe}(z) \Phi(z)}. \end{cases}$$

Module de contre-réactions

Les constantes neutroniques des équations de la diffusion ainsi que de la dynamique xénon (Σ_a , σ_{Xe} , ...) dépendent de l'état du cœur :

- Le taux d'usure du combustible a des répercussions sur les sections de fission.
- Une augmentation locale de la température du combustible provoque une augmentation de la capture des neutrons et donc des sections d'absorption (effet Doppler).
- Une augmentation de température de l'eau entraîne la dilatation de l'eau qui devient moins performante pour ralentir les neutrons (diminution de Σ_r).
- Le niveau d'empoisonnement du cœur (concentration en bore, en xénon) a également un impact sur les sections d'absorptions...

D'autre part, même dans une modélisation 3D du cœur, les équations de la neutronique sont résolues non pas sur la géométrie réelle du cœur mais sur une géométrie simplifiée où, pour un certain niveau de détail, les différents composants du cœur sont agglomérés. Pour des calculs industriels, l'assemblage est décrit comme une pâte homogène (comprenant de l'eau borée, des structures métalliques, du combustible, des grappes de commande par exemple) pour laquelle doivent être calculées les constantes neutroniques correspondantes.

Le calcul de ces constantes neutroniques est donc une étape délicate et est réalisée en amont des codes de simulation des REP. Les constantes neutroniques ainsi calculées sont ensuite rangées dans des bases de données appelées *bibliothèques neutroniques* tabulées en fonction de paramètres représentatifs de l'état de la matière (les paramètres de contre-réactions) pour lequel elles ont

été calculées. A chaque milieu physique donné, correspond donc une bibliothèque. Le vecteur constitué de l'ensemble des paramètres de contre-réactions est appelé point de fonctionnement et noté P^f .

Le module de contre-réactions a pour objectif de calculer les constantes neutroniques à partir de la bibliothèque neutronique et en fonction de l'état de la matière décrit par le point de fonctionnement. Ces constantes sont à évaluer pour chaque nœud du maillage du cœur.

Description de la bibliothèque : Les bibliothèques lues par CIREP1D, sont issues de séries de calculs réalisés avec le code JONAS développé à EDF. JONAS est un code de diffusion qui fait partie de la chaîne de génération de bibliothèques neutroniques pour les codes de cœur d'EDF. CIREP1D ne modélisant qu'un seul milieu (le traitement des réflecteurs inférieur et supérieur dans le module de neutronique, est réalisé à part), une seule bibliothèque est nécessaire à la simulation du cœur 1D.

Cette bibliothèque est construite à partir de calculs réalisés avec JONAS pour différents points de fonctionnement P^f qui sont composés de :

- une valeur d'irradiation (paramètre de contre-réactions p_0),
- une valeur de densité modérateur (paramètre de contre-réactions p_1),
- une valeur de température modérateur (paramètre de contre-réactions p_2),
- une valeur de température combustible (paramètre de contre-réactions p_3),
- une valeur de concentration en xénon (paramètre de contre-réactions p_4),
- une valeur de concentration en bore (paramètre de contre-réactions p_5).

Dans CIREP1D, le point de fonctionnement est donc de dimension 6 :

$$P^f = (p_0, p_1, p_2, p_3, p_4, p_5).$$

Les différentes valeurs d'irradiation sont choisies de sorte qu'elles couvrent une large gamme d'applications. Les valeurs des cinq autres paramètres sont plus restreintes : on a pris seulement deux valeurs pour chaque paramètre (dont une de référence, l'autre constituant une reprise). Le jeu de points de fonctionnement est construit en faisant varier, pour chaque irradiation, un seul des cinq autres paramètres. Au total pour chaque irradiation correspond un point de fonctionnement nominal noté $P_{nom}^{f,bib}$ et cinq points de reprise associés notés $(P_{nom,Ri}^{f,bib})_{i=1..5}$. Quelques points de fonctionnement quelconques complètent la bibliothèque ; on les note dans la suite $P^{f,bib}$.

Modèle de contre-réactions : Le modèle de contre-réactions de CIREP1D est un modèle d'interpolation linéaire, basé sur les six paramètres de contre-réactions de la bibliothèque décrite précédemment. La présence des grappes de commande dans le cœur est prise en compte par un coefficient multiplicateur appliqué après l'étape d'interpolation, sur les sections d'absorption du groupe thermique pour les mailles concernées.

Soit P_f un point de fonctionnement pour lequel on souhaite calculer un jeu de constantes neutroniques désignées génériquement sous la variable Σ . On note p_i le i ème paramètre de contre-réactions. On suppose que chaque constante neutronique Σ est une fonction linéaire des p_i .

$$\Sigma = F_{\Sigma}(p_0, \dots, p_5).$$

Le calcul de Σ s'effectue en deux étapes :

- une première approximation $\tilde{\Sigma}$ est calculée par interpolation linéaire en recherchant un encadrement de l'irradiation p_0 à partir de deux points de fonctionnement $P^{f,bib}(A)$ et $P^{f,bib}(B)$ de la bibliothèque :

$$\tilde{P}^f = \frac{p_0 - p_0^{bib}(A)}{p_0^{bib}(B) - p_0^{bib}(A)} P^{f,bib}(A) + \frac{p_0 - p_0^{bib}(B)}{p_0^{bib}(A) - p_0^{bib}(B)} P^{f,bib}(B),$$

$$\tilde{\Sigma} = \frac{p_0 - p_0^{bib}(A)}{p_0^{bib}(B) - p_0^{bib}(A)} F(P^{f,bib}(A)) + \frac{p_0 - p_0^{bib}(B)}{p_0^{bib}(A) - p_0^{bib}(B)} F(P^{f,bib}(B))$$

- une correction sur $\tilde{\Sigma}$ est apportée à partir des deux points de fonctionnement nominal les plus proches $P_{nom}^{f,bib}(C)$ et $P_{nom}^{f,bib}(D)$, dont les irradiations encadrent l'irradiation de P^f :

$$\Sigma = \tilde{\Sigma} + \sum_{i=1}^5 \frac{F(P_{nom}^{f,bib}(C)) - F(P_{nom,Ri}^{f,bib}(D))}{p_{nom,i}^{bib}(C) - p_{nom,Ri}^{bib}(D)} (p_i - \tilde{p}_i),$$

où les \tilde{p}_i sont les paramètres de contre-réactions du point \tilde{P}^f précédemment calculé.

Corrections supplémentaires à apporter sur les sections d'absorptions : Une fois estimées les sections d'absorption des groupes rapide et thermique, il convient de les corriger pour prendre en compte l'effet du xénon et du bore, selon la formule suivante

$$\Sigma_{ag} = \Sigma_{ag} + \sigma_{ag}^{Xe} C_{Xe} + \sigma_{ag}^B N_B,$$

avec N_B , le nombre de noyaux de bore par cm^3 et g l'indice de groupe d'énergie.

Les fuites radiales sont prises en compte par un terme supplémentaire d'absorption

$$\Sigma_{ag} = \Sigma_{ag} + f_g$$

où le terme de fuite est défini à partir du laplacien radial B^2 : $f_g = D_g B^2$.

Enfin, si la maille pour laquelle sont évaluées les constantes neutroniques contient une grappe de commande, il convient également d'ajouter un surplus d'absorption modélisé par un paramètre α :

$$\Sigma_{ag} = (1 + \alpha) \Sigma_{ag} \quad (3.7)$$

avec $0 < \alpha < 1$ et $g = 1$ ou 2 . Dans CIREP1D, ce paramètre α est indépendant du groupe d'énergie. Il est réglé à partir de calculs de pesée de grappes réalisés avec le code de référence d'EDF (voir section 3.2).

Couplage entre les modules de CIREP1D

Les variables échangées entre les quatre modules présentés sont explicitées dans la figure 3.5.

3.1.3 Calcul d'un régime permanent

On précise à présent comment les modules décrits précédemment sont couplés les uns aux autres dans le but de calculer un régime permanent. Celui-ci est obtenu lorsque la puissance et la position des barres sont maintenues constantes pendant plusieurs heures. Pour que ce régime soit stable, il est nécessaire d'équilibrer la production avec la disparition des neutrons en diluant

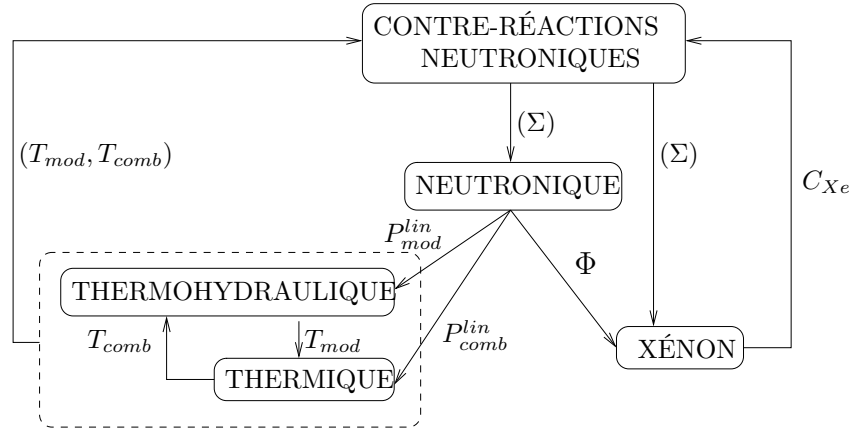


FIG. 3.5. Couplage entre les modules de CIREP1D.

dans le circuit primaire la “bonne” quantité de bore qu’on désigne par l’expression “concentration en bore critique”.

On rappelle formellement les problèmes stationnaires résolus par les modules de CIREP1D. On note entre crochets les données d’entrée du module.

- Le module de neutronique correspond à la résolution d’un problème non linéaire qui peut être représenté sous la forme suivante :

$$\mathcal{F}_{[\Sigma, P(t)]}^{neu}(\Phi, P_{comb}^{lin}, P_{mod}^{lin}, k) = 0,$$

où $P(t)$ désigne la puissance totale fixée par l’utilisateur. L’opérateur \mathcal{F}^{neu} n’est pas connu analytiquement ; il correspond à un calcul de valeur propre, la valeur propre correspondant au facteur multiplicatif k .

- Le module de thermique/thermohydraulique peut s’exprimer sous la forme

$$\mathcal{F}_{[P_{comb}^{lin}, P_{mod}^{lin}]}^{Th}(T_{mod}, T_{comb}) = 0,$$

où \mathcal{F}_{Th} est un opérateur analytique mais non linéaire du fait que les constantes de thermique et thermohydraulique impliquées (capacité calorifique...) dépendent de la température du milieu.

- Le couplage entre l’iode et le xénon peut se mettre sous la forme d’un problème linéaire

$$F_{[\Phi, \Sigma]}^X(C_{Xe}, C_I) = 0.$$

- Le module de contre-réactions correspond à la résolution du problème

$$\mathcal{F}_{[T_{comb}, T_{mod}, C_{Xe}, C_B]}^{CRN}(\Sigma) = 0,$$

où le paramètre de contre-réactions C_B désigne la concentration en bore. On omet la dépendance à l’irradiation du combustible qui est une donnée physique du problème sur laquelle on n’a pas de contrôle.

De ces quatre relations, on en déduit que le bore est une variable explicative de toutes les autres, c’est-à-dire qu’il existe une fonction \mathcal{K} telle que

$$\mathcal{K} : C_B \mapsto (C_{Xe}, C_I, P_{mod}^{lin}, P_{comb}^{lin}, T_{mod}, T_{comb}, k). \quad (3.8)$$

Le calcul de $\mathcal{K}(C_B)$ correspond donc à la résolution en stationnaire d'un problème couplé de neutronique, thermique et thermohydraulique et qu'on appelle *problème à bore imposé*.

Du point de vue numérique, le calcul d'un régime permanent se traduit par la mise en place d'un schéma itératif de recherche de la concentration en bore critique où à chaque itération il faut résoudre un problème à bore imposé.

Résolution du problème à bore imposé : On itère sur les modules de la manière suivante

1. $\mathcal{F}_{[T_{comb}^i, T_{mod}^i, C_{Xe}^i, C_B]}^{CRN}(\Sigma^{i+1}) = 0$
2. $\mathcal{F}_{[\Sigma^{i+1}, P(t)]}^{neu}(\Phi^{i+1}, P_{comb}^{lin, i+1}, P_{mod}^{lin, i+1}, k^{i+1}) = 0$
3. $\mathcal{F}_{[P_{comb}^{lin, i+1}, P_{mod}^{lin, i+1}]}^{Th}(T_{mod}^{i+1}, T_{comb}^{i+1}) = 0$
4. $F_{[\Phi^{i+1}, \Sigma^{i+1}]}^X(C_{Xe}^{i+1}, C_I^{i+1}) = 0$

jusqu'à convergence sur la température modérateur. On souligne qu'aucune preuve théorique ne permet d'affirmer que cet algorithme converge à coup sûr.

Schéma de recherche de bore critique : De (3.8), on définit la fonction $\tilde{\mathcal{K}}$ par :

$$\tilde{\mathcal{K}} : C_B \mapsto k.$$

La résolution du problème critique revient à rechercher la concentration en bore C_B telle que

$$\tilde{\mathcal{K}}(C_B) = 1.$$

On met en place le schéma itératif, appelé schéma de recherche de bore critique, suivant :

- calcul à concentration de bore imposée : $\tilde{\mathcal{K}}(C_B^j) = k^{j+1}$,
- mise à jour de la concentration de bore $C_B^{j+1} = C_B^j + \frac{1}{e} \left(1 - \frac{1}{k^{j+1}} \right)$,

où e est appelée l'efficacité différentielle du bore. Dans l'algorithme de Newton, e correspond au gradient de $\tilde{\mathcal{K}}$ au point C_B^j . En neutronique, on ne réévalue pas cette quantité à chaque itération de la recherche de bore critique. On la fixe une fois pour toute à une valeur comprise entre -8 et -10 pcm $^{-1}$.

3.1.4 Calcul d'un transitoire xénon

On précise à présent comment les modules décrits précédemment sont couplés les uns aux autres dans le but de calculer un transitoire xénon. Dans CIREP1D, le transitoire xénon est modélisé en régime quasi statique : on suppose qu'à chaque pas de temps où est calculée une nouvelle concentration du xénon, le système xénon/neutronique/thermique/thermohydraulique s'est instantanément remis à l'équilibre. A chaque itération du schéma en temps, un calcul à l'équilibre où la concentration en xénon est imposée, est donc réalisé. Le schéma de calcul d'un transitoire xénon correspond à trois niveaux de schémas imbriqués représentés dans la figure 3.6.

La dynamique du xénon est couplée à celle de l'iode. Schématiquement, CIREP1D résout donc une équation différentielle ordinaire de la forme :

$$\frac{\partial(C_{Xe}, C_I)}{\partial t}(z, t) = \mathcal{G}_{[P(t), I_{gr}(t)]}(C_{Xe}, C_I)(z, t), \quad (3.9)$$

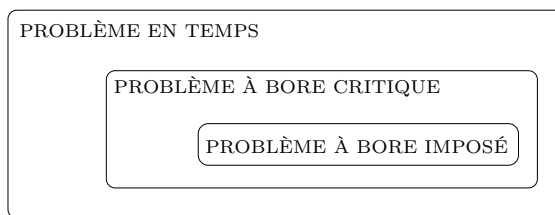


FIG. 3.6. Problèmes imbriqués de la modélisation de la dynamique xénon.

où $P(t)$ et $I_{gr}(t)$ désignent respectivement la puissance totale et l'insertion des grappes fixées par l'utilisateur au temps t . On rappelle que l'équation (3.9) est implémentée dans CIREP1D sous la forme d'un schéma d'Euler implicite en temps.

L'opérateur \mathcal{G} n'est pas connu analytiquement. Il correspond au calcul des variables suivantes qui caractérisent l'état du réacteur :

- les puissances dégagées dans le modérateur et le combustible P_{mod}^{lin} et P_{comb}^{lin} ,
- les températures du modérateur et du combustible T_{mod} et T_{comb} ,
- la concentration en bore critique C_B et le facteur multiplicatif k .

Les concentrations de xénon et d'iode au temps t_{n+1} sont donc solutions d'un problème de la forme

$$\mathcal{F}_{[(C_{Xe}, C_I)^n, P(t_{n+1}), I_{gr}(t_{n+1})]} \left((C_{Xe}, C_I)^{n+1}, P_{mod}^{lin, n+1}, P_{comb}^{lin, n+1}, T_{mod}^{n+1}, T_{comb}^{n+1}, C_B^{n+1} \right) - k^{n+1} = 0, \quad (3.10)$$

avec $k^{n+1} = 1$. Comme \mathcal{G} , l'opérateur \mathcal{F} est non linéaire et n'est pas connu analytiquement. Ce problème correspond à un problème de recherche de bore critique présenté précédemment mais où la concentration xénon n'est plus calculée à saturation mais est imposée.

3.2 Validation

Le code de cœur 3D de référence à EDF s'appelle COCCINELLE [Pet03]. Il est coûteux en terme de temps calcul et son code adjoint n'existe pas. Un second code de référence à EDF est le code 1D LIBELLULE [Fio00] utilisé pour les études en fonctionnement normal des REP où la représentation à une seule dimension axiale est suffisante. Ce code est proche de COCCINELLE du point de vue de la modélisation physique (mêmes modèles de contre-réactions et thermique/thermohydraulique) ; des termes correctifs sont cependant introduits dans le module de neutronique pour prendre en compte les effets radiaux. LIBELLULE est moins coûteux en temps calcul que COCCINELLE mais son adjoint n'est pas non plus disponible et le développement *a posteriori* de cet adjoint n'a pas été jugé réalisable dans le cadre de cette thèse. Le développement de CIREP1D répond à ce double besoin de rapidité de calcul et de disponibilité du code adjoint.

Afin d'être le plus représentatif possible des effets physiques en cœur, CIREP1D est basé non pas sur un modèle point ou bi-point mais sur une modélisation 1D axiale du cœur et une discrétisation de l'énergie à deux groupes, comme dans COCCINELLE et LIBELLULE. CIREP1D contient également un module de thermique et thermohydraulique simplifié pour la prise en compte des effets de contre-réactions liées aux températures combustible et modérateur.

La plus grande différence de modélisation entre d'un côté, les codes COCCINELLE et LIBELLULE et de l'autre CIREP1D, se situe au niveau du modèle de contre-réactions qui est

basé d'une part sur des interpolations linéaires et d'autre part sur la lecture d'une bibliothèque neutronique de type différent de ceux acceptés par COCCINELLE et LIBELLULE. Ce dernier point est très important puisqu'il interdit toute comparaison fine avec les codes COCCINELLE et LIBELLULE. En effet une donnée essentielle d'une simulation neutronique est la bibliothèque neutronique qui caractérise l'état du cœur. A cette bibliothèque neutronique, est associé un modèle de contre-réactions. Comme le modèle de contre-réactions de COCCINELLE est incompatible avec celui de CIREP1D, CIREP1D n'accepte pas les bibliothèques lues par COCCINELLE et LIBELLULE (et inversement) Il est donc impossible de réaliser le même calcul et de comparer les résultats.

Plutôt qu'une validation quantitative (avec marges d'erreur), on propose dans cette section une validation qualitative de CIREP1D sur un calcul en régime permanent et un transitoire type où l'on vérifie que les constantes de temps et les ordres de grandeur des variables sont respectés. Le cœur modélisé est un 1300 MW. Quelques paramètres ont été identifiés comme permettant de recalculer dans une certaine mesure le code CIREP1D sur les résultats de COCCINELLE. Il s'agit :

- du coefficient d'absorption des barres de contrôle,
- du débit de l'eau,
- et surtout de la nappe d'irradiation 1D.

Ces recalages se justifient par l'approximation 1D du cœur réalisée. Avant de présenter plus en détail ces éléments de validation, on décrit rapidement le code de cœur COCCINELLE.

3.2.1 Présentation succincte de COCCINELLE

COCCINELLE constitue actuellement le code de cœur 3D de référence d'EDF [Pet03]. Il est écrit en Fortran et sa première version date du milieu des années 80. EDF développe actuellement un nouveau code destiné à lui succéder.

L'objet de COCCINELLE est le calcul de la distribution volumique de puissance dans un cœur 2D ou 3D en statique ou en cinétique. Pour ce faire, COCCINELLE intègre :

- un module de neutronique résolvant en statique ou cinétique les équations de la diffusion neutronique à 2 groupes d'énergie,
- un module de thermohydraulique (modèle 1D axial) et de thermique du combustible,
- un module de contre-réactions basé sur une analyse physique du couplage de la neutronique à la thermique du combustible et la thermohydraulique du modérateur,
- un module d'évolution isotopique du combustible pour rendre compte de l'épuisement du combustible en matières fissiles.

Il existe, dans COCCINELLE, deux niveaux de description de la géométrie et appelés "modes" : le mode crayon par crayon consiste à individualiser le traitement de chaque crayon composant les assemblages du cœur par opposition au mode assemblage où l'assemblage est vu comme une pâte homogène. Le mode assemblage nécessite un post-traitement sur la puissance volumique calculée afin de rendre compte des hétérogénéités au sein de l'assemblage.

COCCINELLE est au centre de nombreuses applications comme par exemple la recherche de plans de rechargement (c'est-à-dire la recherche d'un positionnement efficace des assemblages dans le cœur en fonction de leur degré d'irradiation) ou les études d'accident.

3.2.2 Calculs en régime permanent

On rappelle qu'un calcul en régime permanent correspond à un calcul de cœur à l'équilibre ; cet état d'équilibre est atteint après plusieurs heures de fonctionnement sans mouvement des grappes de commande ni variation de la puissance dégagée. Le régime permanent nous permet de régler les paramètres suivants :

- le débit Q (équation 3.3, page 69),
- le poids des grappes (coefficient α de la formule (3.7) page 76)

et de comparer les champs de puissance et xénon calculés par COCCINELLE et CIREP1D.

Débit et profil de température modérateur

Le débit volumique Q exprimé en $\text{m}^3.\text{s}^{-1}$ est une donnée d'entrée de CIREP1D. La valeur du débit volumique en fonctionnement nominal vaut, dans COCCINELLE, $95000 \text{ m}^3.\text{h}^{-1}$ pour un 1300 MW. Toute l'eau du circuit primaire ne traverse cependant pas le cœur actif : une fraction se retrouve dans les structures internes de la cuve. On estime ainsi dans COCCINELLE, que la fraction du débit nominal traversant le cœur est de 0.972 soit un débit effectif de $25.65 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$.

Afin d'obtenir le bon profil 1D de température modérateur, ce débit est estimé à $27.15 \text{ m}^3.\text{s}^{-1}$ dans CIREP1D. On considère que cette élévation du débit permet de compenser une partie des hypothèses de simplification dues à la modélisation 1D. On donne dans la figure 3.7, deux profils de températures 1D issus de calculs avec COCCINELLE et CIREP1D. Le calcul est réalisé à 80% PN (puissance nominale). Dans le cas du calcul COCCINELLE, on a représenté le profil axial de température du canal moyen et la discrétisation axiale est faite sur 38 mailles au lieu des 30 de CIREP1D. Moins d'un demi-degré sépare les températures en sortie de cœur calculées par COCCINELLE et CIREP1D.

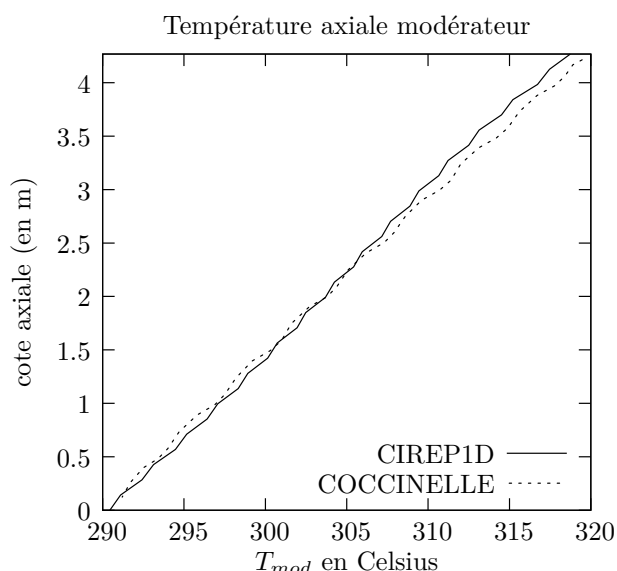


FIG. 3.7. Température axiale du modérateur calculée d'une part par COCCINELLE (discrétisation sur 38 mailles) et d'autre part par CIREP1D (discrétisation sur 30 mailles). Le calcul est réalisé à 80% PN.

Poids des grappes

On rappelle que les grappes de commande sont des absorbants de neutrons qu'on insère par le haut du réacteur pour diminuer la réactivité ou au contraire qu'on extrait pour augmenter la réactivité. L'anti-réactivité des grappes varie un peu en fonction de l'avancement dans le cycle : elle est plus importante en début de cycle lorsque le combustible est peu irradié qu'en fin de cycle. Ces grappes sont réparties en différents groupes selon leur fonction et leur pouvoir d'absorption des neutrons ; leur distribution radiale est homogène afin d'avoir un contrôle sur l'ensemble du cœur. Dans le cadre de la modélisation 1D axiale de CIREP1D, ces différents groupes fonctionnels n'en forment plus qu'un. Ce "super" groupe est modélisé dans CIREP1D par un terme supplémentaire d'absorption introduit dans le calcul des sections d'absorption Σ_{a1} et Σ_{a2} (formule (3.7)) :

$$\Sigma_{ag} = (1 + \alpha)\Sigma_{ag}.$$

Pour déterminer la valeur du paramètre α , on choisit de régler l'absorption équivalente de ce "super" groupe sur le groupe de régulation (groupe qui assure le suivi de charge). Dans ce but, on s'appuie sur un calcul de pesée des grappes avec le code COCCINELLE. Un tel calcul consiste à calculer l'écart de réactivité entre un état du cœur où les grappes sont très partiellement insérées et le même état avec des grappes insérées presque complètement.

Le calcul de pesée de grappes avec COCCINELLE est mené dans les conditions suivantes :

- la puissance totale dégagée par le cœur est de 0.9 PN (c'est-à-dire 90% de la puissance nominale soit 3400 MW thermiques),
- la température d'entrée est fixée à 297.1°C,
- hormis les grappes du groupe de régulation, toutes les grappes sont extraites.

On effectue deux calculs de réactivité :

- le premier est mené avec le groupe de régulation inséré de 35 pas dans le cœur (soit environ de 57.6 cm), c'est-à-dire presque au minimum ;
- le second est réalisé avec le groupe de régulation inséré de 255 pas dans le cœur (soit environ de 418.6 cm), c'est-à-dire presque au maximum.

L'écart de réactivité trouvé par COCCINELLE est d'environ 999 pcm. CIREP1D n'offrant pas la fonctionnalité de calcul de réactivité, on va utiliser l'écart de concentration en bore critique qui est ici de 114.6 ppm de bore.

On utilise cet écart de concentration en bore comme *indicateur* (et non comme référence) puisque les deux calculs CIREP1D et COCCINELLE ne sont pas réalisés sur le même cœur pour fixer l'absorption des grappes dans CIREP1D. En effectuant un calcul du même type et en posant $\alpha = 2\%$, on obtient un écart de 138 ppm de bore qui est jugé acceptable pour les études menées ultérieurement. A titre de comparaison, on signale qu'une absorption de 5% conduit à un écart de 360 ppm de bore.

Irradiation

Avant de s'intéresser à la comparaison des champs 1D de puissance et de xénon calculés par COCCINELLE et CIREP1D, il est important de faire un point sur le profil 1D d'irradiation. On rappelle que les constantes neutroniques sont tabulées dans la bibliothèque neutronique en fonction de l'irradiation. Comme COCCINELLE et LIBELLULE, CIREP1D prend en entrée un champ d'irradiation décrivant le niveau d'usure du combustible. Pour pouvoir comparer CIREP1D et COCCINELLE, il faut donner en entrée à CIREP1D, le profil 1D d'irradiation équivalent au profil 3D utilisé dans le calcul COCCINELLE. Il est possible d'obtenir le profil

axial 1D d'une nappe d'irradiation 3D de COCCINELLE mais ce profil 1D est basé sur le maillage axial à 38 mailles usuellement utilisé dans COCCINELLE. Il est donc nécessaire de projeter ce profil 1D, basé sur le maillage de COCCINELLE, sur le maillage à 30 mailles de CIREP1D tout en conservant le niveau moyen d'irradiation exprimé en MWjour/t. Cette étape est délicate car les calculs de transitoire sont relativement sensibles au profil axial de xénon : il est possible de corriger un biais dans le déséquilibre axial de puissance en modifiant les irradiations de seulement quelques mailles (une variation de 1% peut suffire pour CIREP1D). Dans la suite, on s'est efforcé de prendre des profils 1D d'irradiation les plus fidèles possibles aux champs d'irradiation 3D tout en essayant de rester également proche des axial offsets de puissance de COCCINELLE. On donne dans la figure 3.8, le profil d'irradiation 1D utilisé par CIREP1D pour les calculs présentés ci-après.

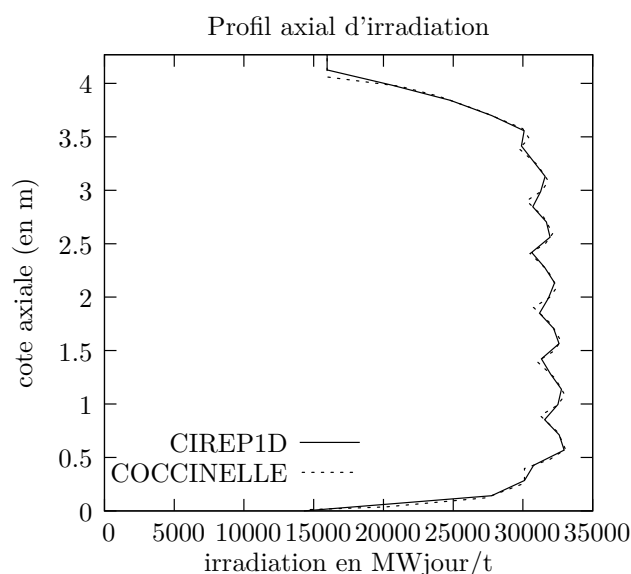


FIG. 3.8. *Profils axiaux d'irradiation de COCCINELLE (sur 38 mailles) et de CIREP1D (sur 30 mailles) utilisés pour la comparaison du transitoire xénon. L'irradiation moyenne cœur est de 29161 MWjour/t pour COCCINELLE et de 29159 MWjour/t pour CIREP1D*

Champs 1D de puissance et de xénon

On présente dans la figure 3.9 les champs 1D de puissance et concentration xénon 1D obtenus par COCCINELLE et CIREP1D pour un calcul stationnaire à 80% PN et avec des grappes insérées de 22.98 cm. Les ordres de grandeur des champs sont respectés. Néanmoins le profil de puissance calculé par CIREP1D est nettement plus creusé que celui calculé par COCCINELLE : les puissances dégagées dans la partie médiane du cœur sont sous-estimées par CIREP1D tandis que les puissances dégagées dans les parties supérieures et inférieures sont sur-estimées. L'approximation 1D de la nappe 3D d'irradiation peut certainement être responsable d'une surestimation de l'usure du combustible dans la partie médiane et ainsi conduire à une sous estimation de la puissance dans cette même partie. On peut également penser que les constantes des réflecteurs inférieur et supérieur pourraient être mieux ajustées afin d'avoir une estimation plus juste du flux neutronique dans les mailles supérieures et inférieures : les valeurs utilisées actuellement dans CIREP1D sont des valeurs utilisées par défaut dans COCCINELLE lorsque les réflecteurs axiaux sont maillés.

En ce qui concerne la concentration xénon, son niveau total semble plus important dans le calcul CIREP1D. On rappelle qu'ici le xénon est calculé à saturation. Or à flux neutronique élevé (comme c'est le cas ici), le niveau de xénon à saturation n'est plus fonction du flux et en approximation monogroupe, on a

$$C_{Xe} = \frac{\gamma_{Xe}\Sigma_f}{\sigma_{Xe}}.$$

Les différences constatées entre les profils xénon de la figure 3.9 sont donc plutôt à mettre sur le compte de la bibliothèque neutronique utilisée.

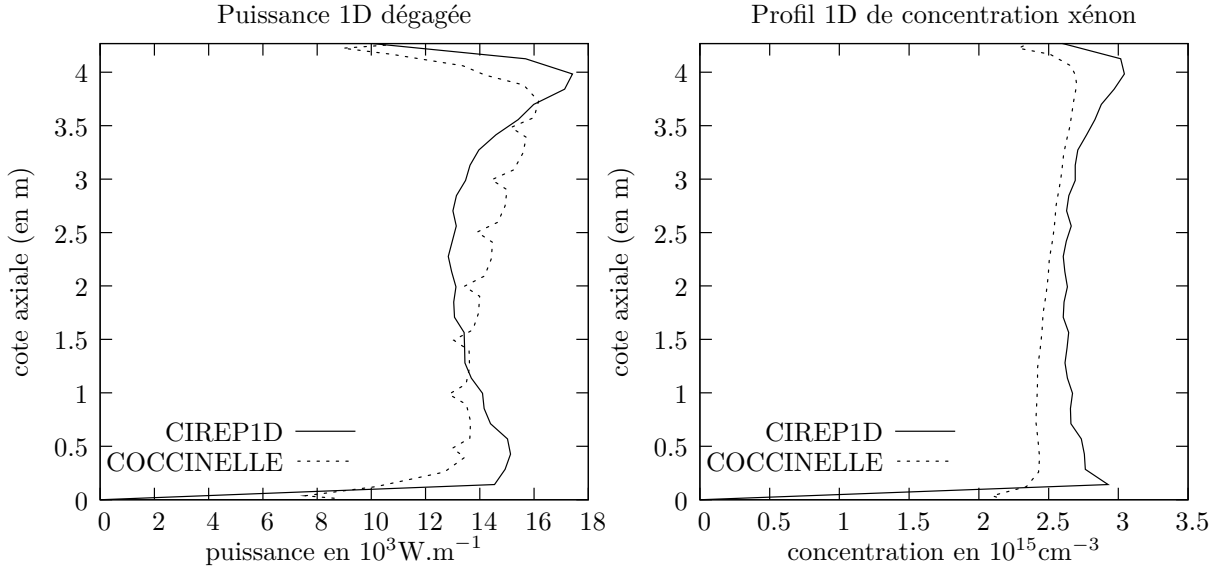


FIG. 3.9. Profils 1D de puissance et de xénon calculés par COCCINELLE et CIREP1D en statique à 80% PN et avec des grappes insérées de 22.98 cm dans le cœur.

3.2.3 Calcul de dynamique xénon

On présente ci-après les résultats d'une simulation d'un transitoire xénon sur une période de 5 jours (120 heures). Les calculs sont réalisés à 80% PN et avec les profils d'irradiation présentés dans la figure 3.8 et avec les consignes d'insertion des grappes de commande (groupe de régulation pour COCCINELLE) présentées dans le tableau 3.2 : quelques mouvements des grappes sont demandés pendant la première heure de la simulation puis on maintient la position des grappes constante. Le transitoire ainsi calculé correspond à la simulation d'une oscillation xénon *divergente* : il n'y a pas d'amortissement de l'oscillation xénon déclenchée pendant la première heure. Si on poursuit la simulation sur un intervalle de temps plus long, on constate que cette oscillation atteint un cycle limite. Une oscillation convergente, c'est-à-dire où les oscillations s'amortissent, est présentée dans la section 3.4.

La fréquence et l'amplitude de l'oscillation de puissance et xénon calculées par CIREP1D sont du même ordre de grandeur que celles calculées par COCCINELLE (figure 3.10). Le début du transitoire est cependant plus différencié entre COCCINELLE et CIREP1D. Cela peut provenir de trois facteurs :

- l'absorption des grappes : elle est un peu plus élevée dans CIREP1D et donc le mouvement des grappes pendant la première heure provoque un plus grand déséquilibre de puissance entre les moitiés supérieure et inférieure du cœur ;

- la bibliothèque neutronique ;
- et la nappe d'irradiation.

temps (en secondes)	pas d'insertion	insertion en <i>cm</i>
0.	246	22.98
30.	238	36.11
60.	220	65.66
90.	220	65.66
120.	220	65.66
150.	220	65.66
1830.	220	65.66
1860.	220	65.66
1920.	220	65.66
2010.	255	8.21
2250.	255	8.21
432000.	255	8.21

TAB. 3.2. Consignes d'insertion du groupe de régulation pour *COCCINELLE* et *CIREP1D*. Les pas d'insertion sont au nombre de 260.

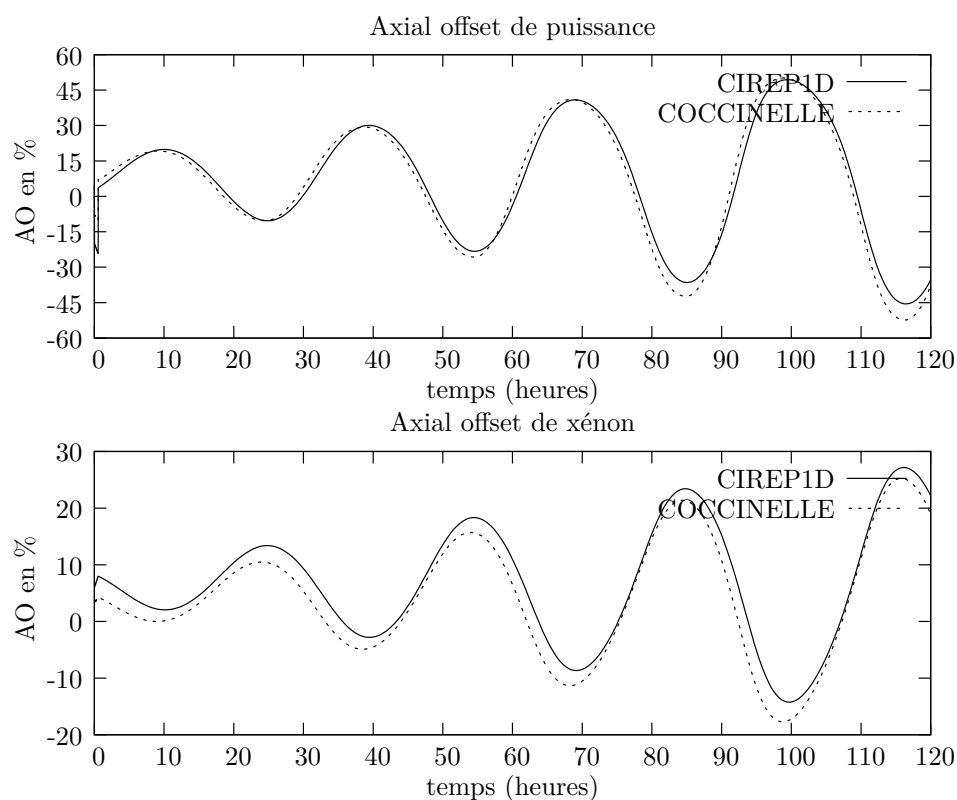


FIG. 3.10. Axial offset de puissance et xénon pour les codes *COCCINELLE* et *CIREP1D* pour le transitoire décrit dans le tableau 3.2.

Au temps final de la simulation, on a les profils de puissance et de xénon donnés dans la

figure 3.11. Bien que les maxima des champs calculés par CIREP1D soient un peu plus élevés que ceux calculés par COCCINELLE, on garde des profils assez similaires.

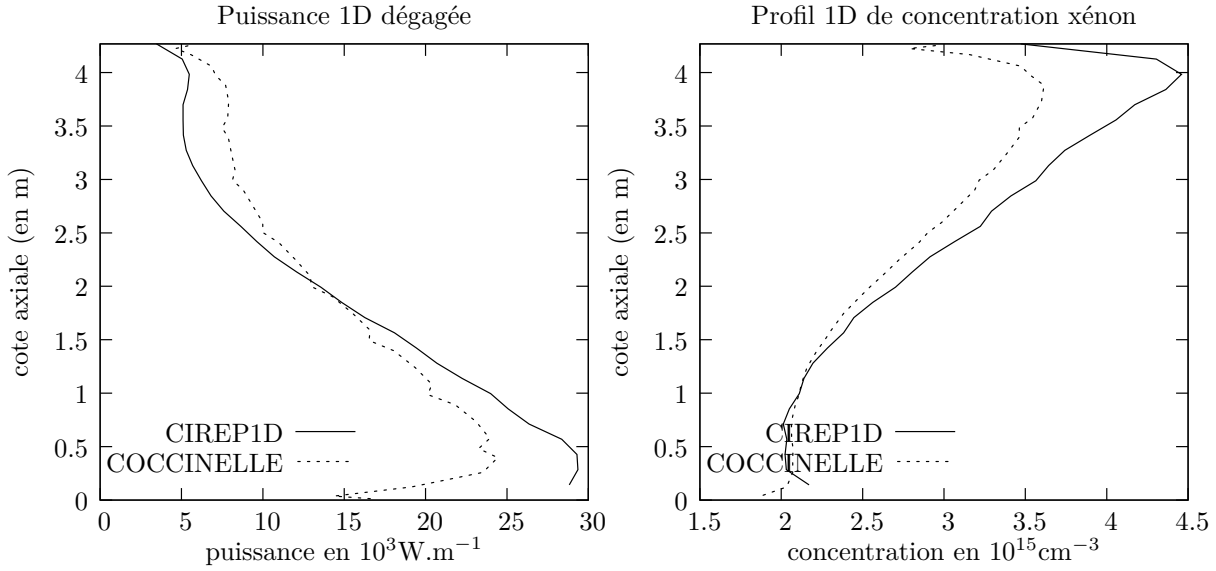


FIG. 3.11. Profils 1D de puissance et de xénon calculés par COCCINELLE et CIREP1D au temps final ($T=120$ heures) de la simulation du transitoire xénon.

Il n'est pas possible de pousser plus loin les comparaisons puisque les bibliothèques neutroniques utilisées pour ce calcul sont différentes. A la suite des calculs et des comparaisons COCCINELLE/CIREP1D menés ici, on estime que la précision des calculs réalisés avec CIREP est suffisante pour les applications visées.

3.3 Modèles tangent et adjoint de CIREP1D

Les méthodes d'assimilation variationnelles 3DVAR et 4DVAR conduisent à la minimisation d'une fonction coût non linéaire. La plupart des algorithmes de minimisation demande la dérivée de la fonction coût. Cette dérivée nécessite le calcul du linéaire tangent et/ou de l'adjoint de l'opérateur d'observation et du modèle [Tal87]. Choisir d'utiliser l'adjoint lorsque la taille de l'espace d'observation est inférieur à celle de l'espace du vecteur d'état permet de réduire *a priori* le coût de calcul de la dérivée. Les codes tangent et adjoint de CIREP1D ont été obtenus par différentiation automatique avec l'outil TAPENADE développé à l'INRIA de Sophia-Antipolis (voir 2.6.2 et [Tap04]). Les codes générés ont ensuite été validés à l'aide des tests du gradient et du produit scalaire présentés ci-après. De par les calculs supplémentaires introduits, les codes tangent et adjoint sont plus chers que les codes originaux. On précise dans la suite la performance de ces codes générés. Pour conclure cette section, on présente les avantages et inconvénients de la différentiation automatique à travers le retour d'expérience positif de la différentiation de CIREP1D par TAPENADE.

3.3.1 Différentiation du modèle direct

On rappelle que la maquette CIREP1D permet de réaliser des calculs stationnaires avec recherche de bore critique ainsi que des calculs de dynamique xénon. Pour les expériences d'assimilation présentées dans la suite, on s'intéresse à la différentiation du calcul de dynamique xénon. Les sorties de CIREP1D identifiées pour un tel calcul sont :

- la concentration en bore critique C_B ,
- le facteur de multiplication effectif k ,
- le flux neutronique 1D à deux groupes d'énergie $(\Phi_1(z), \Phi_2(z))$,
- la concentration 1D en xénon $C_{Xe}(z)$,
- la concentration 1D en iode $C_I(z)$,
- la température 1D du modérateur $T_{mod}(z)$,
- la température combustible 2D (radial et axial) $T_{comb}(r, z)$,
- la puissance 1D dégagée dans le modérateur $P_{mod}^{lin}(z)$,
- la puissance 1D dégagée dans le combustible $P_{comb}^{lin}(z)$.

au temps final de la simulation. Les entrées sont les concentrations 1D de xénon et d'iode au temps initial de la simulation.

La différentiation de CIREP1D est menée avec l'outil TAPENADE développé à l'INRIA [Tap04]. TAPENADE est très peu intrusif dans le code original. Il suffit de transformer le programme principal en sous-routine prenant en argument les variables d'entrées et de sorties citées précédemment. La différentiation du code est réalisée en appelant TAPENADE avec l'option appropriée (mode direct, tangent ou adjoint) et en précisant quelles sorties sont à différentier par rapport à quelles entrées. Le code généré tient dans un seul fichier (même si les sources du code original sont réparties dans divers fichiers).

Pour les expériences d'assimilation menées dans la suite, on différentie la concentration en bore et les puissances 1D dégagées dans le combustible obtenues au temps final par rapport aux concentrations 1D initiales de xénon et d'iode.

3.3.2 Validation des codes produits

Une fois les codes tangent et adjoint générés, il reste à vérifier que ces codes effectuent correctement la tâche qui leur est assignée. Il existe deux tests qui permettent de détecter des erreurs dans la génération de code. Il s'agit du test du gradient et du test du produit scalaire. On attire l'attention sur le fait que la réussite à ces tests n'implique pas l'absence d'erreurs dans les codes générés. En revanche, leur non-réussite implique des codes générés erronés.

Le test du gradient s'appuie sur le développement de Taylor à l'ordre 2 du modèle \mathcal{M} implémenté dans le code original :

$$\mathcal{M}(\mathbf{X} + \alpha d\mathbf{X}) = \mathcal{M}(\mathbf{X}) + \alpha \nabla_{\mathbf{X}} \mathcal{M}(\mathbf{X}) \cdot d\mathbf{X} + \alpha^2 O(\|\mathbf{X}\|)$$

où \mathbf{X} désigne le vecteur d'entrée du code original. Si le linéaire tangent $\mathbf{M}_{|\mathbf{X}}$ au point \mathbf{X} produit par TAPENADE est exact, alors le résidu

$$\mathcal{R}(\alpha) = \mathcal{M}(\mathbf{X} + \alpha d\mathbf{X}) - \mathcal{M}(\mathbf{X}) - \alpha \mathbf{M}_{|\mathbf{X}} \cdot d\mathbf{X}$$

est en $O(\alpha^2)$. En fixant \mathbf{X} , $d\mathbf{X}$ et en faisant varier le paramètre α , le test consiste à vérifier que $\mathcal{R}(\alpha)$ varie en α^2 .

Le test du produit scalaire est basé sur la définition du modèle adjoint noté $\mathbf{M}_{|\mathbf{X}}^*$ qui implique l'égalité suivante :

$$\langle \mathbf{M}_{|\mathbf{X}} \mathbf{X}, \mathbf{Y} \rangle = \langle \mathbf{X}, \mathbf{M}_{|\mathbf{X}}^* \mathbf{Y} \rangle . \quad (3.11)$$

Pour valider le modèle adjoint, on calcule les deux produits scalaires pour différents couples de vecteurs (\mathbf{X}, \mathbf{Y}) et on vérifie numériquement l'égalité (3.11).

Ces deux tests ne peuvent se faire que pour quelques points \mathbf{X} et quelques directions $d\mathbf{X}$. Ils ne peuvent donc pas être exhaustifs.

3.3.3 Performances des codes tangent et adjoint

On donne à présent quelques éléments sur la performance des codes générés par TAPENADE. Le code tangent généré par cet outil fournit, en plus des sorties du code original, la dérivée de certaines sorties par rapport à certaines entrées. Le coût d'un calcul réalisé avec le linéaire tangent est donc a minima deux fois plus élevé qu'un calcul réalisé avec le code direct. Le coût théorique du linéaire tangent donné par les concepteurs de TAPENADE est de 3 à 4 fois le coût du code original. En pratique, on a retrouvé cet ordre de grandeur dans les expérimentations menées.

Le surcoût occasionné par le calcul de l'adjoint est en revanche plus difficile à évaluer. Les instructions devant être évaluées à la fois dans le sens original et dans le sens inverse du code, beaucoup de calculs et de stockage supplémentaires sont nécessaires. Le coût théorique d'un calcul avec l'adjoint généré par TAPENADE est de 5 à 6 fois le coût de celui effectué avec le code original. Ce n'est absolument pas l'ordre de grandeur retrouvé dans les calculs menés. Pour une simulation d'une dynamique xénon de trois heures, ce coût est plutôt entre 13 et 14 fois le coût du code original! Une explication plausible pour cette différence d'ordre de grandeur est la présence de nombreuses boucles imbriquées dans CIREP1D (plus précisément 5 schémas imbriqués). Les variables intermédiaires calculées dans les boucles du code direct doivent être disponibles lors de l'évaluation des instructions de cette même boucle en mode inverse. Il s'ensuit soit un recalcul soit un stockage de ces variables selon la stratégie adoptée par le différentiateur et donc un surcoût important lorsque ces boucles sont en plus imbriquées. Il est probable d'autre part que certaines options de TAPENADE permettent d'optimiser le coût de l'adjoint. Mais nous avons préféré ne pas y recourir afin de ne pas complexifier davantage le code produit et éviter de générer des codes potentiellement plus porteurs d'erreurs que les codes générés non optimisés.

3.3.4 Retour d'expérience sur la différentiation automatique

Pour terminer cette section, on propose un début de réflexion sur la différentiation automatique à travers l'expérience conduite sur CIREP1D. La différentiation automatique avec TAPENADE (et probablement avec tous les autres outils de différentiation automatique) comportent des inconvénients. Dans le cas de la différentiation de CIREP1D, ceux-ci ont été heureusement largement compensés par les avantages qu'apporte un outil automatique.

Inconvénients

Lisibilité : Le principal reproche que l'on peut adresser à TAPENADE est le manque de lisibilité des codes produits :

- La structure du code en terme de fichiers n'est pas conservée puisque le code généré est regroupé dans un seul fichier.

- Certains commentaires du code initial disparaissent dans le code généré ou parfois en mode inverse sont déplacés, rendant plus difficile la recherche d’erreurs dans le code tangent ou adjoint.
- L’ajout de variables intermédiaires complique la relecture du code généré.
- En mode inverse, la stratégie du “checkpointing” où les résultats d’un bloc d’instruction sont stockés en mémoire pour économiser du temps de calcul, alourdit considérablement le code (instruction de type PUSH et POP pour sauvegarder et restaurer les résultats de calcul).

Pour illustrer ces propos, on présente en annexe C, un exemple de code source différencié par TAPENADE. Ce manque de lisibilité est surtout gênant lorsqu’on sait que le code produit peut contenir des erreurs et qu’il faut trouver ces erreurs. Un moyen efficace de procéder consiste d’abord à générer le code direct (c’est le code initial mais “relu” par TAPENADE) et à s’assurer que ce code ne comporte pas lui-même des erreurs (normalement la structure du code direct est identique à celle du code initial et les commentaires n’ont pas bougé : seules des variables intermédiaires ont été introduites). Il faut ensuite s’intéresser au code tangent, un peu plus complexe que le code direct mais plus lisible que le code adjoint. Après ces deux étapes, on peut générer le code adjoint. Des options de TAPENADE permettent de supprimer des optimisations dans la génération de code et peuvent parfois permettre de faciliter la tâche.

Restrictions de langage : D’autres inconvénients de TAPENADE se situent dans ses restrictions de langage : le Fortran 90 est accepté mais pas l’allocation dynamique et les GO TO du Fortran 77 sont mal gérés (ce qui exclut la différenciation des bibliothèques du style LAPACK). Certaines instructions imbriquées, conformes à la norme du Fortran, sont parfois mal interprétées par TAPENADE. L’avantage de ces erreurs d’interprétation de langage, c’est d’une part qu’elles sont facilement identifiables (elles apparaissent dès le code direct et ne sont parfois même pas acceptées par le compilateur). Et d’autre part, cela contraint à écrire le code initial en adéquation avec la norme TAPENADE. Ce point exclut d’une certaine façon l’utilisation *a posteriori* de la différenciation automatique ou bien implique un certain coût de redéveloppement du code.

Performance des codes générés : Il est probable qu’une personne développant le tangent d’un code soit capable de l’écrire de manière plus optimisée que TAPENADE en regroupant certaines instructions. Il est difficile d’affirmer que cela se vérifie également pour la génération de l’adjoint : la gestion mémoire des variables intermédiaires est peut-être plus efficace et plus sûre avec TAPENADE. Dans le cadre de CIREP1D où cohabitent cinq niveaux de boucles imbriquées et où par conséquent un grand nombre de variables intermédiaires doivent être stockées ou recalculées, la différenciation automatique présente probablement un plus par rapport à la différenciation à la main.

Avantages

Facilité de prise en main : TAPENADE est très facile à utiliser du fait de sa conception. Il est très peu intrusif (ce n’est pas le cas de tous les différenciateurs automatiques) : il ne nécessite que le changement de l’entête du programme principal. Le changement des variables d’entrée et de sortie à prendre en compte pour la différenciation est donc très aisé. Cela constitue un avantage important en assimilation de données lorsqu’on souhaite changer fréquemment le vecteur de contrôle et/ou le vecteur d’observation.

Maintenance : La maintenance du code est un autre point important à prendre en compte si le code n'est pas complètement mature. Une fois que le code à différencier est bien nettoyé et que l'on respecte certaines contraintes d'écriture pour le développement de nouvelles fonctionnalités, la mise à jour des codes tangent et adjoint est quasi immédiate.

Et la différentiation des grands codes ?

En météorologie, les adjoints des codes opérationnels ont été développés en même temps que les codes directs. Dans le domaine de la neutronique, ce n'est pas le cas. L'utilisation *a posteriori* d'un différentiateur automatique sur les codes existants de neutroniques a déjà été tentée il y a une dizaine d'années et s'est soldée par un échec. En fait, la question de la disponibilité du code tangent et/ou adjoint doit être posée au moment même du développement du code direct. Le recours à un différentiateur automatique peut être envisagé si le code est développé dans un langage informatique accepté par les outils de différentiation existants. Même s'il existe des différentiateurs pour les codes en C++ (avec surcharge d'opérateur pour [Gri96]), il semble plus réaliste à l'heure actuelle de développer soi-même les codes linéaire tangent et adjoint. Cela devrait être rendu plus facile par l'orientation objet du langage.

3.4 Trois simulations de transitoires xénon

On propose à présent d'étudier des transitoires type de la dynamique couplée iode/xénon. Une donnée importante d'un transitoire xénon est la nappe d'irradiation : les sections efficaces dépendent en effet de l'irradiation du combustible. Le degré d'usure du combustible n'est pas homogène dans le cœur. Pour cette raison, on fournit aux codes de neutroniques des champs 1D, 2D ou 3D d'irradiation en fonction de la description du cœur retenue. La dissymétrie de la nappe 1D axiale d'irradiation est responsable en partie de l'axial offset de puissance. La nappe d'irradiation joue également un rôle sur l'évolution d'une oscillation xénon. Lorsque le cœur avance dans le cycle, la diminution des sections de fission entraîne une augmentation du flux neutronique moyen. Cette augmentation du flux engendre une instabilité dans la dynamique xénon par l'intermédiaire du terme $-\sigma_{Xe}\Phi C_{Xe}$ dans les équations xénon (système (3.6), page 74). On peut donc voir apparaître des oscillations xénon divergentes en fin de cycle.

On présente ci-après le résultat de la simulation avec CIREP1D de trois transitoires xénon :

- une dynamique convergente où l'oscillation xénon amorcée en début de simulation s'amortit (cœur en milieu de cycle) ;
- une dynamique divergente où l'oscillation xénon amorcée en début de simulation s'amplifie pour atteindre un cycle limite (cœur en fin de cycle) ;
- un pic xénon suite à un arrêt d'urgence.

3.4.1 Dynamique convergente (simulation A)

Cette simulation porte sur un intervalle de 200 heures. Le transitoire modélisé correspond à un suivi de charge avec variation de la puissance et mouvement des grappes pendant 3 heures puis à un fonctionnement avec puissance fixe et sans mouvement de grappes. Ces données du transitoire sont indiquées dans le tableau 3.3. L'irradiation moyenne du combustible est de 18615 MWjour/t (correspond à un cœur en milieu de cycle).

temps		Puissance (en MW)	Insertion des grappes (en cm)
en hh:mm	(en sec)		
00:00	(0)	3800	0.
00:15	(900)	3800	0.
00:30	(1800)	3700	7.7
01:00	(3600)	3650	37.8
01:30	(5400)	3500	27.8
02:00	(7200)	3000	77.8
02:15	(8100)	3100	47.8
03:00	(10800)	3250	47.8
04:00	(14400)	3450	14.7
200:00	(720000)	3450	14.7

TAB. 3.3. Caractéristiques du transitoire de la simulation A.

Ce transitoire est simulé par CIREP1D avec un pas de temps d'intégration de 900 secondes (15 minutes). Les concentrations initiales de xénon et d'iode sont celles à l'équilibre. Les résultats de cette simulation sont représentés dans les figures 3.12 et 3.13. Au bout d'une trentaine d'heures, l'amplitude de l'oscillation a diminué de moitié. Au bout de trois jours environ, cette oscillation a presque disparu.

3.4.2 Dynamique divergente (simulation B)

On s'intéresse à présent à la simulation d'une dynamique xénon divergente où les oscillations ne s'amortissent pas. La puissance dégagée par le cœur est fixée à 80% PN. Les consignes d'insertion des grappes sont décrites dans le tableau 3.2 (quelques mouvements des grappes sont demandés pendant la première heure de la simulation puis les grappes sont maintenues à position constante). L'irradiation moyenne pour ce calcul est de 29159 MWjour/t (correspond à un cœur en fin de cycle). Les oscillations xénon s'amorcent suite au mouvement des barres (figures 3.14 et 3.15) et s'amplifient. Elles atteignent un cycle limite au bout de 200 heures environ (figure 3.15). En pratique, cette situation n'est jamais rencontrée dans les centrales puisqu'on "casse" les oscillations xénon dès qu'elles sont détectées. Un essai d'oscillation divergente a cependant été réalisé en 1982 dans la centrale de Tricastin [Fio01].

3.4.3 Pic xénon (simulation C)

On termine ce chapitre par la simulation d'un arrêt d'urgence avec chute des grappes. Dans un premier temps, le cœur fonctionne presque à pleine puissance (98% PN) pendant 4 heures avec les barres insérées de 57.7 cm dans le cœur. Les concentrations initiales étant fixées aux concentrations à l'équilibre, le cœur reste stable pendant ces quatre heures (visible pour la concentration xénon dans les figures 3.16a et 3.17). A la quatrième heure, les grappes chutent dans le cœur et stoppent la réaction en chaîne. Le flux de neutrons est alors quasi nul (il reste toujours quelques relâchements de neutrons par les produits de fission) et cesse d'alimenter le réservoir d'iode. Ce dernier voit alors son niveau baisser par désintégration beta. Ce phénomène de vidange est cependant relativement lent puisqu'il faut environ une journée pour épuiser le réservoir d'iode. Pendant ces huit heures, le niveau de xénon dans le cœur va quant à lui augmenter. En effet, le xénon disparaît habituellement par deux voies : désintégration radioactive

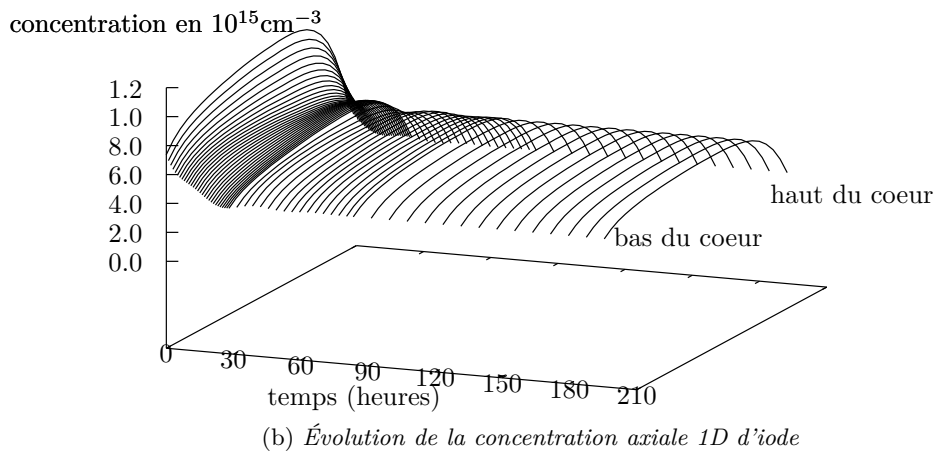
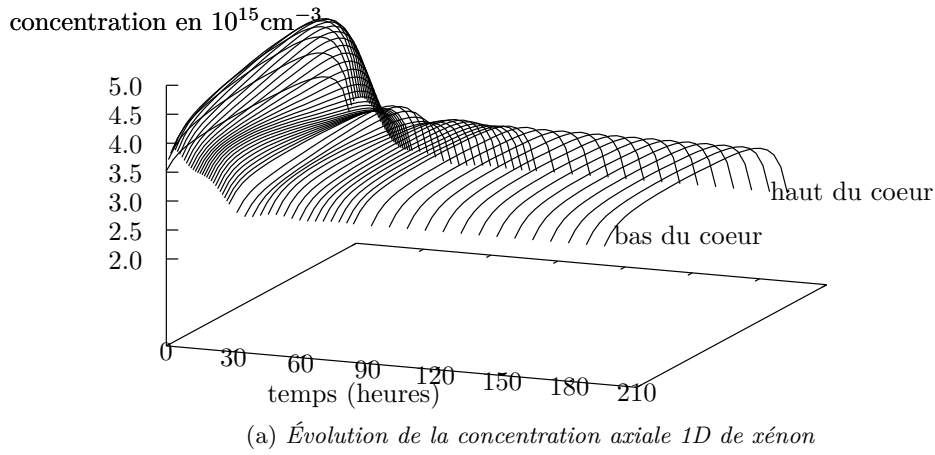


FIG. 3.12. Champs 1D de xénon et d'iode calculés par CIREP1D pour la simulation A. Les oscillations s'amortissent au cours du temps.

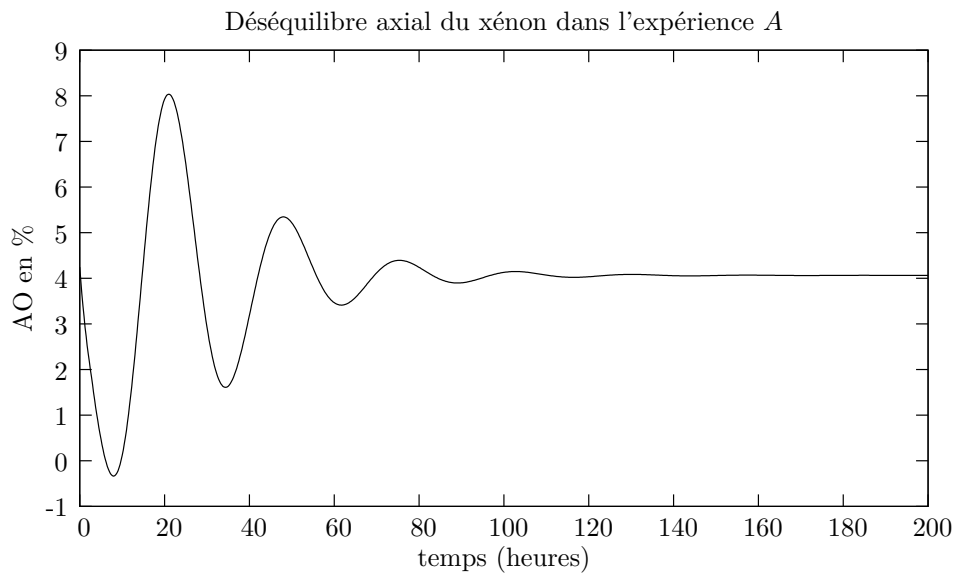
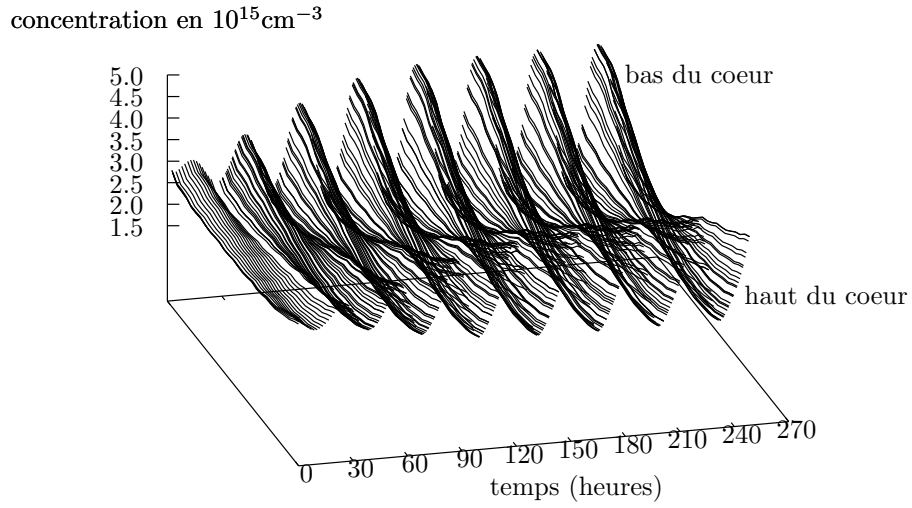
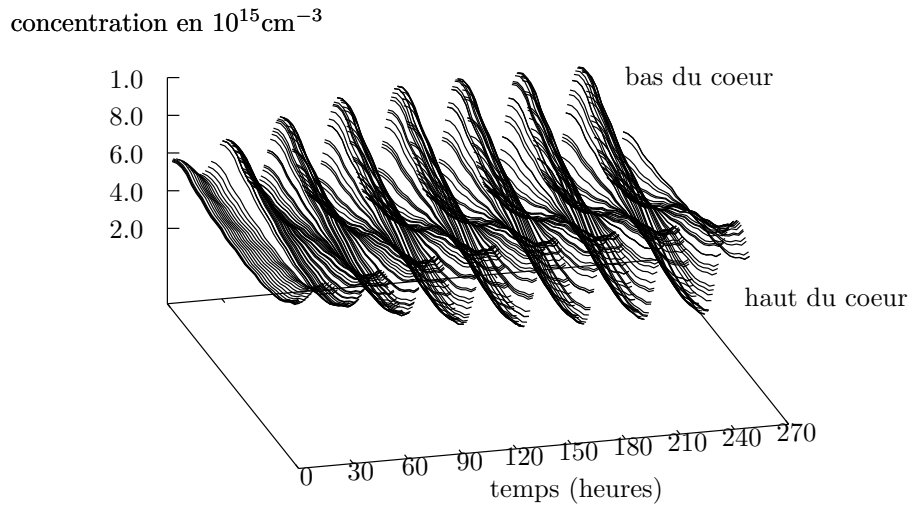


FIG. 3.13. Déséquilibre axial du xénon calculé par CIREP1D pour la simulation A.



(a) Évolution de la concentration axiale 1D de xénon



(b) Évolution de la concentration axiale 1D d'iode

FIG. 3.14. Champs 1D de xénon et d'iode calculés par CIREP1D pour la simulation B. Les oscillations se succèdent et s'amplifient au cours du temps.

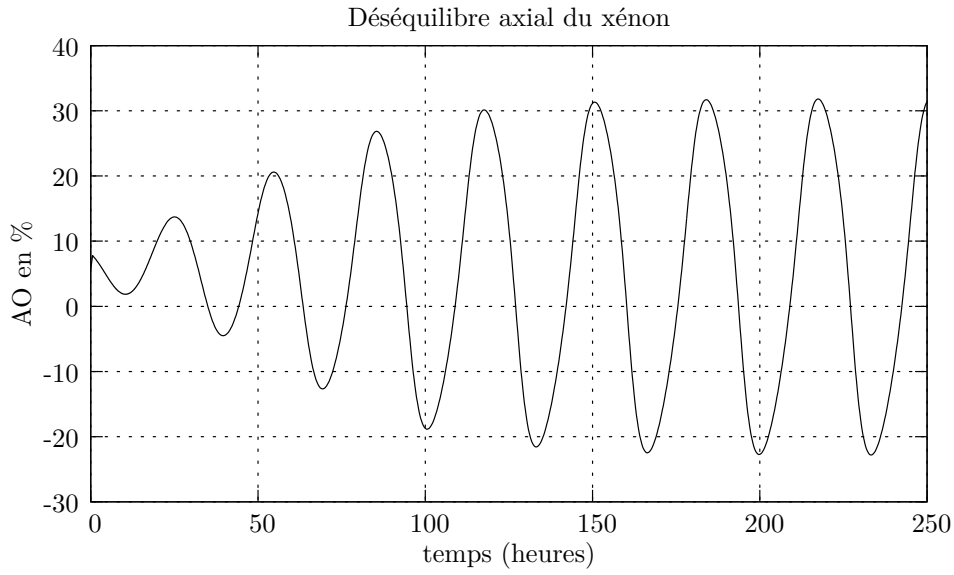
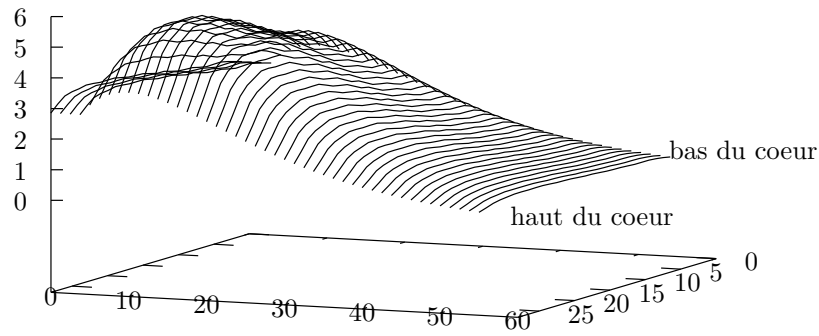


FIG. 3.15. Axial offset de xénon calculé par CIREP1D pour la simulation B.

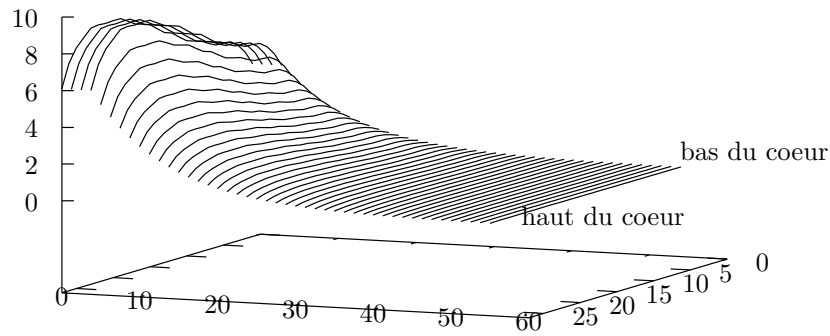
et capture neutronique. Mais la deuxième voie étant bloquée en absence de flux neutronique, il ne reste que la première voie qui se déroule sur une échelle de temps plus longue que celle de la désintégration de l'iode en xénon. Le niveau de xénon dans le cœur augmente donc pour atteindre, au bout d'environ huit heures, un maximum représentant un empoisonnement du cœur deux fois supérieur à l'empoisonnement à l'équilibre [Bar93]. Au bout d'une journée cependant, cet empoisonnement est revenu à son niveau avant l'arrêt d'urgence et au bout de quelques jours, la concentration du xénon est quasi nulle.

concentration en 10^{15}cm^{-3}



(a) Évolution de la concentration axiale 1D de xénon

concentration en 10^{15}cm^{-3}



(b) Évolution de la concentration axiale 1D d'iode

FIG. 3.16. Champs 1D de xénon et d'iode calculés par CIREP1D pour la simulation C. On distingue le pic xénon au temps $T = 12\text{h}$. La concentration d'iode, elle, ne cesse de baisser à partir de la chute des grappes.

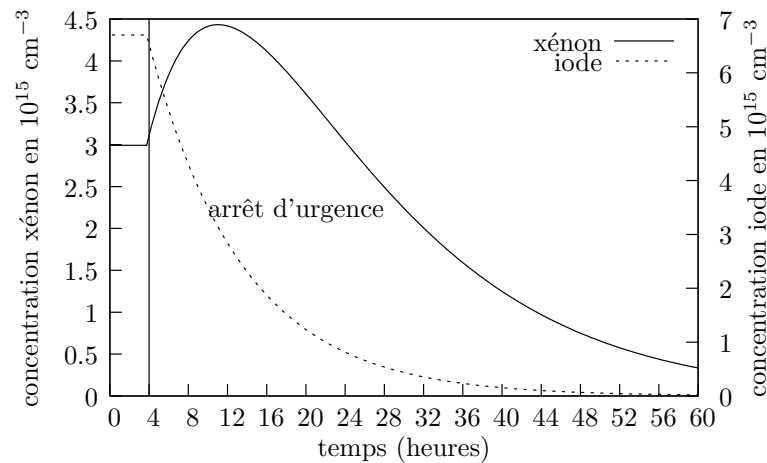


FIG. 3.17. Concentrations de xénon et d'iode calculés par CIREP1D pour la simulation C dans une maille située dans la moitié inférieure du cœur. Le pic xénon est atteint environ 8 heures après l'arrêt d'urgence puis le niveau de xénon revient à son niveau d'équilibre au bout d'une journée environ pour être nul au bout de quelques jours.

4

Description du schéma d'assimilation 4DVAR

On souhaite mettre en place un système d'assimilation variationnelle de type 4DVAR pour améliorer la connaissance des concentrations initiales de xénon et iode et ce, dans le cadre d'expériences jumelles. On a présenté au chapitre précédent le code CIREP1D implémentant un modèle 1D de dynamique xénon. Il s'agit à présent d'identifier l'espace des observations et de préciser l'espace de contrôle, c'est-à-dire l'espace dans lequel on définit la fonction coût \mathcal{J}_{4DVAR} de la méthode 4DVAR (section 4.1). Il faut ensuite faire un choix de modélisation des matrices de covariances d'erreur d'ébauche \mathbf{B} et d'observation \mathbf{R} (section 4.2). L'assemblage du schéma constitue la dernière étape et la dernière partie de ce chapitre (section 4.3). On décrit d'abord le mode expérimental permettant d'obtenir dans le cadre des expériences jumelles les vecteurs d'ébauche et d'observation. Puis on précise la plateforme de couplage ayant servi à l'assemblage du schéma.

Pour conclure, on propose quelques expériences d'assimilation très simples permettant de s'assurer du bon fonctionnement du schéma et de donner par anticipation sur le chapitre 6 quelques éléments sur le comportement du système. Les aspects liés à la minimisation de la fonction coût (préconditionnement, algorithmes de minimisation) font l'objet du chapitre 5.

4.1 Chaîne d'assimilation

4.1.1 Précision des notations

On rappelle l'expression de la fonction coût de la méthode 4DVAR, présentée à la section 2.4, et dont on explicite les différents éléments dans ce chapitre :

$$\mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} (\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) \quad (4.1)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{nobs-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \right)^T \mathbf{R}_i^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \right). \quad (4.2)$$

L'opérateur $\mathcal{M}_{i,0}$ correspond au modèle 1D de dynamique xénon/iode implémenté dans le code CIREP1D. Ce modèle est basé sur l'enchaînement d'une suite de calculs stationnaires avec la résolution des équations temporelles du xénon et de l'iode. Chaque calcul stationnaire correspond à une recherche de bore critique à concentration xénon imposée.

Le vecteur d'état $\mathbf{X}(t_i) \in \mathbb{R}^n$ de cette dynamique est composé des concentrations 1D de xénon et d'iode au temps t_i notées respectivement $C_{Xe}(t_i)$ et $C_I(t_i)$. La connaissance *a priori* de l'état $\mathbf{X}(t_0)$ est notée \mathbf{X}^b . Les entrées du modèle \mathcal{M} sont

- les temps initial t_0 et final t_N de la simulation de la dynamique ;
- l'état du système au temps initial t_0 et noté $\mathbf{X}(t_0)$;
- les données du transitoire, c'est-à-dire la consigne de puissance et de position des barres au cours de l'intervalle de temps représenté ; cette consigne peut être interprétée comme une suite de **termes de forçage** u_i aux temps $t_0 \leq t_i \leq t_N$ regroupés dans le vecteur $\mathbf{u}(t_0, \dots, t_N) = (u_0, \dots, u_N)$.

Dans la suite, le calcul par CIREP1D des concentrations xénon et iode au temps t_i est représenté par l'expression suivante :

$$\mathbf{X}(t_i) = \mathcal{M}(t_0, t_i, \mathbf{u}(t_0, \dots, t_i), \mathbf{X}(t_0))$$

ou avec une notation plus condensée :

$$\mathbf{X}(t_i) = \mathcal{M}_{i,0}^{\mathbf{u}}(\mathbf{X}(t_0)).$$

On omet dans la suite l'indice \mathbf{u} .

On cherche à améliorer la connaissance du vecteur d'état \mathbf{X} en t_0 , en assimilant à n_{obs} instants t_i compris entre t_0 et t_N , des observations \mathbf{Y}_i^{obs} du système dynamique xénon-iode. Pour les applications visées, ces observations ne sont pas de même nature que l'état \mathbf{X} . On introduit donc l'opérateur d'observation \mathcal{H} reliant l'espace des vecteurs d'état à celui des vecteurs d'observation

$$\begin{aligned} \mathcal{H} : \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R}^p \\ \mathbf{X}(t_i) &\mapsto \mathcal{H}(\mathbf{X}(t_i)). \end{aligned}$$

Cet opérateur d'observation peut être très simple lorsqu'on assimile des observations de même nature que le vecteur d'état. Dans le cadre des expériences présentées dans ce mémoire, \mathcal{H} est non linéaire. Quel que soit le type des observations, l'évaluation de cet opérateur en un point \mathbf{X} comprend un calcul réalisé en statique avec CIREP1D. Ce calcul revient à rechercher un cœur à l'équilibre (c'est-à-dire ayant une réactivité nulle) en ajustant la concentration en bore (calcul de recherche de bore critique à concentration xénon imposée). Le coût de ce calcul est équivalent

au coût d'évaluation du modèle \mathcal{M} sur un pas de temps. **Une caractéristique importante des expériences menées ici est donc la quasi équivalence en complexité et en coût de calcul de l'évaluation du modèle \mathcal{M} et de l'opérateur \mathcal{H} en un point \mathbf{X} .** Dans ce contexte, la mise en place d'un algorithme de type 3DFGAT semble peu intéressante. En effet, dans le 3DFGAT, le vecteur des innovations est approché de la manière suivante [Fis01] :

$$\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \approx \mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b) + (\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)).$$

On remplace ainsi le calcul de la trajectoire issue de \mathbf{X}^b par un calcul moins coûteux. Mais il reste cependant l'évaluation de $\mathcal{H}(\cdot)$ qui dans notre situation est presque aussi chère.

On peut décrire à présent les espaces d'observation et de contrôle. On précise par avance que des changements d'unité sont appliqués afin de réduire les différences d'échelle entre les différentes variables manipulées (xénon et puissance par exemple) : cela est préférable à la fois pour la formulation du problème d'assimilation (et notamment pour le choix de la répartition des poids donnés à l'ébauche et aux observations) et pour la minimisation du problème (conditionnement par exemple). Ces changements d'unité sont précisés dans les paragraphes correspondants.

4.1.2 Espace de contrôle

On a vu précédemment que le vecteur d'état est composé des différentes valeurs de la concentration xénon C_{Xe} et iode C_I aux nœuds du maillage 1D de CIREP1D. La fonction coût du 4DVAR n'est pas nécessairement définie dans l'espace du vecteur d'état. On peut souhaiter par exemple réduire la taille du problème de minimisation en projetant le vecteur d'état sur un espace plus petit. Ce dernier constitue alors l'espace de contrôle.

On décrit dans la partie III (à partir de la page 145), deux types d'application possibles de l'assimilation de données en neutronique :

- la perte du KIT (chapitre 7) où il est nécessaire de réinitialiser les concentrations xénon et iode d'un code 1D de suivi de cœur ;
- le suivi du cœur (chapitre 8).

Le second item correspond à une application temps réel pour laquelle il est important de réduire autant que possible le coût de l'assimilation. Dans ce cadre, il est préférable de travailler dans un espace de contrôle de taille réduite. On propose donc deux espaces de contrôle différents pour ces deux applications.

Pour les raisons évoquées précédemment, on change l'unité des concentrations de xénon et d'iode. Celles-ci sont habituellement exprimées en cm^{-3} ou en 10^{24}cm^{-3} (pour faciliter les multiplications avec les sections microscopiques exprimées en barns, c'est-à-dire en 10^{-24}cm^2). Dans la suite, les concentrations sont exprimées en 10^{15}cm^{-3} .

Estimation précise du profil initial : Les grilles de maintien du combustible sont régulièrement espacées sur toute la hauteur du cœur. De par leur absorption d'une partie des neutrons, elles conduisent à une diminution des fissions et donc à une plus faible irradiation du combustible dans les zones où elles se situent. Un profil 1D d'irradiation prenant en compte les grilles ressemble alors à un profil en "dent de scie" : l'irradiation est en effet moins élevée au niveau des grilles de maintien du fait de l'absorption d'une partie des neutrons par les grilles. Le flux neutronique dépendant fortement du profil d'irradiation, les profils 1D de flux, puissance, xénon et iode sont également en dent de scie (voir figure 4.1).

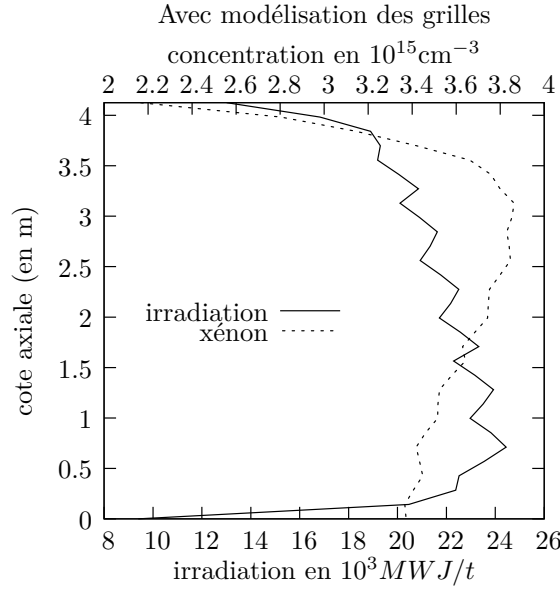


FIG. 4.1. Profil d'irradiation et profil du xénon calculé à saturation. Lorsque les grilles de maintien du combustible sont prises en compte dans le profil d'irradiation (irradiation moins élevée du combustible du fait de l'absorption d'une partie des neutrons par les grilles), elles font apparaître des irrégularités dans le profil de puissance et donc dans celui du xénon.

Pour reproduire le plus fidèlement ces profils, il est préférable de prendre un vecteur de contrôle plaqué sur la discrétisation des concentrations. Dans le modèle \mathcal{M} qu'implémente CI-REP1D, ces dernières sont discrétisées aux nœuds d'un maillage 1D. Ce maillage 1D couvre la partie active du cœur ainsi que les réflecteurs inférieur et supérieur ; il compte 50 mailles réparties de la manière suivante :

- 30 mailles pour la partie active,
- 10 mailles pour chaque réflecteur.

Comme il n'y a pas de combustible dans les réflecteurs, la concentration de xénon et d'iode est par conséquent nulle dans les mailles réflecteurs. Il est donc inutile de recalcr les concentrations initiales dans ces 20 mailles : l'espace du vecteur d'état est donc différent de l'espace dans lequel est défini la fonction coût. Le vecteur de contrôle comporte ainsi 30 valeurs de concentration pour chacune des deux espèces soit en tout $n = 60$ valeurs.

Puisque les composantes du vecteur de contrôle sont des valeurs d'un champ physique aux nœuds d'un maillage, il n'y a pas de contrainte contenue dans le vecteur de contrôle. En l'absence de contraintes imposées sur les composantes, la minimisation de la fonctionnelle du 4DVAR peut conduire à obtenir une analyse dont le profil est d'autant moins physique que le poids de l'ébauche est faible. On impose des contraintes sur les composantes en introduisant des corrélations spatiales lors de la construction de la matrice d'erreur d'ébauche \mathbf{B} (section 4.2). Ces contraintes spatiales sont en revanche inutiles lorsqu'on modélise les concentrations 1D à l'aide d'un profil paramétré.

Estimation grossière du profil initial : Si l'on souhaite seulement connaître l'orientation du déséquilibre axial, il est suffisant de recalcr un profil approché et non plus exact des concentrations de xénon et d'iode. Dans ce cadre, on propose de décomposer les concentrations 1D de

xénon et d'iode sur une base de sinus :

$$C(z) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{i=1}^N \left\{ a_i \cos\left(i \frac{2\pi z}{T}\right) + b_i \sin\left(i \frac{2\pi z}{T}\right) \right\}.$$

La taille N de la base et la période T sont à fixer. Il est possible de faire des choix distincts pour les deux espèces. Le vecteur de contrôle est alors constitué des paramètres a_i et b_i , soit de $2 + 2 * N_{Xe} + 2 * N_I$ paramètres.

On présente dans la figure 4.2 des profils de xénon et d'iode calculés pour différents choix de paramètres T_{Xe} , T_I , N_{Xe} et N_I . On retient pour la suite le paramétrage suivant :

$$\begin{cases} T_{Xe} = 50, & N_{Xe} = 4 \\ T_I = 40, & N_I = 3 \end{cases}$$

ce qui représente un vecteur de contrôle de taille 16 (à comparer à la taille 60 du vecteur d'état).

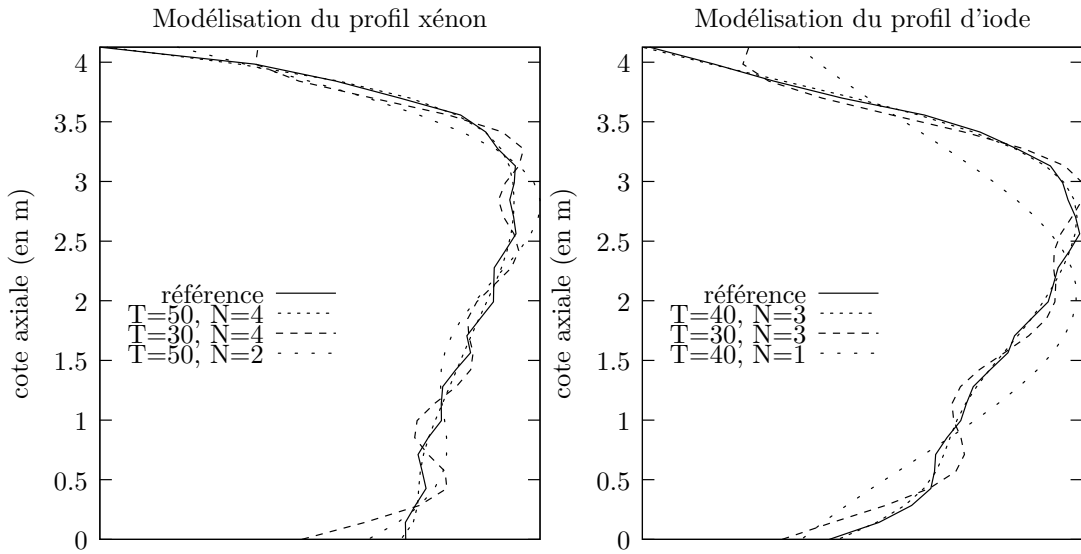


FIG. 4.2. Représentation des concentrations axiales de xénon et d'iode par des bases de sinus. Le profil axial d'iode peut être développé sur une base plus petite que le profil axial de xénon du fait d'une moins grande sensibilité des constantes neutroniques de l'iode à la présence des grilles

4.1.3 Espace d'observation

L'instrumentation nucléaire du réacteur est présentée dans le chapitre 1. Les mesures continues ou quasi continues de l'état du cœur sont fournies par

- les chambres externes qui renseignent sur la distribution axiale de flux à travers la mesure d'activité (taux de fission) dans chacun des quadrants et des 6 tranches axiales du cœur ;
- les thermocouples qui donnent une carte radiale des températures de l'eau en sortie du cœur ;
- le boremètre qui mesure la concentration en bore du circuit primaire.

Les températures de l'eau en sortie de cœur ne sont pas suffisamment sensibles au déséquilibre axial de xénon qui peut s'opérer dans le cœur. On élimine donc les mesures provenant des thermocouples : on n'utilise dans la suite que des informations provenant du boremètre et des

chambres externes avec un traitement particulier pour ces dernières. Les activités mesurées par les chambres externes sont des combinaisons linéaires du flux neutronique régnant dans le cœur. Pour ne pas complexifier davantage l'opérateur d'observation, on préfère utiliser les puissances dégagées dans le combustible qui sont également des combinaisons linéaires du flux et sont calculées par CIREP1D. Cela ne change en rien les résultats présentés. Ces mesures de puissance peuvent être des valeurs à différentes cotes axiales du champ 1D de puissance dégagée dans le combustible ou des valeurs intégrées sur plusieurs mailles. Le déséquilibre de puissance entre les moitiés inférieure et supérieure du cœur est traité comme une mesure distincte. Il est défini ici comme étant la différence de puissance dégagée dans les moitiés supérieure et inférieure du cœur.

En résumé, le vecteur d'observation au temps t_i est composé :

- de la mesure de la concentration en bore (1 scalaire noté C_B et exprimé en 10^{-3} ppm),
- de l'axial offset de puissance (1 scalaire noté AO, sans unité),
- en fonction des expériences, de mesures des valeurs aux nœuds, des valeurs intégrées sur plusieurs mailles de la puissance dégagée dans le combustible, soit $p - 1$ mesures exprimées en 10^{-4} W. Ces mesures sont notées P_{comb} .

Les facteurs 10^{-4} et 10^{-3} permettent de réduire les différences numériques d'échelle entre les deux types de mesure sans recourir à des variables normalisées. Cette procédure permet d'éviter d'éventuels problèmes d'ordre numérique lors de la minimisation de la fonction coût.

Il est possible à présent de spécifier plus précisément l'opérateur d'observation \mathcal{H} :

$$\mathcal{H} : (C_{Xe}, C_I) \mapsto (P_{comb}, AO, C_B).$$

L'évaluation de cet opérateur en un point $\mathbf{X} = (C_{Xe}, C_I)$ s'effectue en deux étapes :

- calcul de recherche de bore critique (à concentration xénon imposée). Ce calcul donne accès au champ de puissance 1D dégagée dans le combustible P_{comb}^{1D} et à la concentration en bore critique C_B . Ce calcul ne nécessite pas la connaissance de la concentration d'iode.
- évaluation de l'axial offset et des puissances intégrées sur plusieurs mailles.

On remarque que l'opérateur d'observation **n'utilise pas la concentration d'iode**.

Les codes tangent et adjoint de l'opérateur d'observation sont obtenus également en deux étapes. Le code informatique correspondant au calcul de recherche de bore critique est différentié avec le différentiateur automatique TAPENADE. Le code informatique correspondant à la seconde étape est différentié à la main.

Le chapitre 6 montre le rôle de ces différentes mesures dans la qualité de l'analyse produite.

4.2 Modélisation des matrices de covariance d'erreur

Les matrices \mathbf{B}^{-1} et \mathbf{R}_i^{-1} qui apparaissent dans la formulation de la fonction coût du 4DVAR rappelée en (4.1), permettent d'attribuer plus ou moins de poids au terme d'ébauche ou au terme des observations. La construction des matrices \mathbf{B} et \mathbf{R}_i repose sur la modélisation des erreurs d'ébauche ϵ^b et d'observation ϵ_i^{obs} définies au temps t_i par

$$\begin{cases} \epsilon^b = \mathbf{X}^t - \mathbf{X}^b, \\ \epsilon_i^{obs} = \mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^t)). \end{cases}$$

Ces erreurs peuvent être vues comme des réalisations des variables aléatoires ϵ^b et ϵ_i^{obs} . On

définit alors \mathbf{B} et \mathbf{R}_i comme étant les matrices de covariance de ces variables aléatoires :

$$\begin{cases} \mathbf{B} = E[(\epsilon^b - E[\epsilon^b]) (\epsilon^b - E[\epsilon^b])^T], \\ \mathbf{R}_i = E[(\epsilon_i^{obs} - E[\epsilon_i^{obs}]) (\epsilon_i^{obs} - E[\epsilon_i^{obs}])^T]. \end{cases}$$

Les lois de ces variables aléatoires sont inconnues mais on fait souvent l'hypothèse qu'elles sont gaussiennes et centrées. Cette hypothèse est reprise dans les expériences décrites dans ce mémoire.

La modélisation des erreurs d'ébauche est distincte de celle des erreurs d'observation. En effet, ces dernières sont liées à un processus de mesure : les informations statistiques de premier et second ordres (moyenne et matrice de covariance) sont donc *a priori* fournies avec l'appareil de mesure. L'hypothèse souvent posée d'indépendance des erreurs de mesures conduit de plus à considérer des matrices \mathbf{R}_i diagonales. L'ébauche provenant fréquemment d'un calcul antérieur, il est plus difficile de connaître les caractéristiques de l'erreur d'ébauche (moyenne, variance) et de déterminer le niveau de corrélation entre les différentes composantes du vecteur d'erreur d'ébauche.

4.2.1 Modélisation des matrices de covariance \mathbf{R}_i

On rappelle qu'on note p la taille du vecteur d'observation. On fait l'hypothèse que les matrices \mathbf{R}_i sont identiques (pas de dégradation de la qualité de la mesure au cours du temps) et que les erreurs de mesure ne sont pas corrélées. On note, pour un cœur à l'équilibre

- P_{comb}^{eq} , la puissance linéique dégagée dans le combustible et σ_{Rp} l'écart-type de son erreur de mesure (30% par défaut)
- AO_P^{eq} , la différence de puissance entre les moitiés supérieure et inférieure du cœur et σ_{RAO} l'écart-type de son erreur de mesure (10% par défaut),
- C_B^{eq} , la concentration en bore critique et σ_{Rb} l'écart-type de son erreur de mesure (1% par défaut).

Les matrices \mathbf{R}_i au temps t_i sont alors données par

$$\forall 0 \leq i < n_{obs}, \mathbf{R} = \begin{pmatrix} (\sigma_{Rp} \max(P_{comb}^{eq}))^2 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & (\sigma_{Rp} \max(P_{comb}^{eq}))^2 & \\ & & & (\sigma_{RAO} AO_P^{eq})^2 \\ 0 & & & & (\sigma_{Rb} C_B^{eq})^2 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

L'introduction de l'élément maximum en z du vecteur puissance P_{comb}^{eq} et de la concentration en bore à l'équilibre C_B^{eq} dans la diagonale de \mathbf{R}_i a des conséquences sur le conditionnement de la matrice : plus l'écart est grand entre les éléments maximaux des deux types d'information, plus le conditionnement est mauvais.

4.2.2 Modélisation univariée de la matrice de covariance \mathbf{B}

On propose ici une modélisation univariée de la matrice \mathbf{B} , c'est-à-dire une modélisation ne considérant pas de corrélation entre les espèces xénon et iode.

En modélisation univariée, la matrice \mathbf{B} de taille $n \times n$ est donc diagonale par bloc

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_{Xe} & 0 \\ 0 & \mathbf{B}_I \end{pmatrix}$$

où les blocs \mathbf{B}_{Xe} et \mathbf{B}_I correspondent respectivement aux covariances des erreurs d'ébauche sur le xénon et l'iode, et sont de taille $n/2$. Les blocs \mathbf{B}_{Xe} et \mathbf{B}_I contiennent donc les covariances univariées des deux espèces.

Modélisation des corrélations spatiales

Dans nos expériences d'assimilation, l'ébauche provient d'une simulation réalisée avec le code CIREP1D dans des conditions légèrement différentes de celles constituant l'état de référence. Lorsque les composantes du vecteur d'état sont les valeurs aux nœuds des concentrations de xénon et d'iode, il semble naturel de supposer que l'erreur commise sur l'une des composantes soit corrélée avec celles commises sur les composantes voisines. La modélisation des corrélations spatiales revient donc à

- choisir une fonction de corrélation,
- déterminer le voisinage de corrélation.

On cherche alors à mettre les blocs univariés \mathbf{B}_{Xe} et \mathbf{B}_I sous la forme de produits matriciels :

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_{Xe} &= \mathbf{\Sigma}_{Xe} \mathbf{\Gamma}_{Xe} \mathbf{\Sigma}_{Xe}, \\ \mathbf{B}_I &= \mathbf{\Sigma}_I \mathbf{\Gamma}_I \mathbf{\Sigma}_I\end{aligned}$$

où

- les matrices diagonales $\mathbf{\Sigma}_{Xe}$ et $\mathbf{\Sigma}_I$ de taille $n/2 \times n/2$ sont composées des variances des erreurs ;
- les matrices $\mathbf{\Gamma}_{Xe}$ et $\mathbf{\Gamma}_I$ de taille $n/2 \times n/2$ sont les matrices de corrélation des erreurs.

La construction des blocs étant la même quelle que soit l'espèce considérée, on expose seulement ci-après la construction de \mathbf{B}_{Xe} .

La matrice des variances $\mathbf{\Sigma}_{Xe}$ est construite selon le même schéma que celui retenu pour les matrices de covariance d'erreur d'observation \mathbf{R}_i :

$$\mathbf{\Sigma}_{Xe} = \begin{pmatrix} (\sigma_{Bxe} \max(C_{Xe}^{eq}))^2 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & (\sigma_{Bxe} \max(C_{Xe}^{eq}))^2 \end{pmatrix}.$$

Ici les maxima des concentrations axiales servent également à équilibrer le poids des concentrations xénon par rapport aux concentrations d'iode. On attire l'attention sur le fait que les écarts-types σ_{Bxe} et σ_{BI} n'ont aucune raison d'être identiques.

On modélise les corrélations spatiales entre les différentes composantes des vecteurs concentration par la fonction de corrélation de Balgovind décrite dans [Gas99] :

$$\Gamma_{Xe}(z_i, z_j) = (1 + |z_i - z_j|/L) \exp(-|z_i - z_j|/L)$$

entre deux points z_i et $z_j \in \mathbb{R}$. Le paramètre L est l'échelle de corrélation qu'il s'agit de fixer. Pour $z_i = z_j$, la corrélation est maximum : $\Gamma_{Xe}(z_i, z_j) = 1$. La corrélation tend vers 0 lorsque la distance entre les deux points z_i et z_j augmente.

Dans CIREP1D, la discrétisation 1D du cœur est régulière ; on a donc

$$|z_i - z_j| = |i - j| \Delta z$$

où Δz désigne le pas de discrétisation spatiale. La fonction de corrélation peut donc s'écrire sous la forme suivante

$$\Gamma_{Xe}(z_i, z_j) = (1 + |i - j|/\tilde{L}) \exp(-|i - j|/\tilde{L})$$

avec $\tilde{L} = L/\Delta z$. On omet le $\tilde{}$ dans la suite. La figure 4.3 montre différents profils de la fonction de corrélation de Balgovind en fonction de z_i et de L . On présente dans la figure 4.4 la valeur des éléments de la matrice de corrélation Γ_{Xe} pour différents choix du paramètre L .

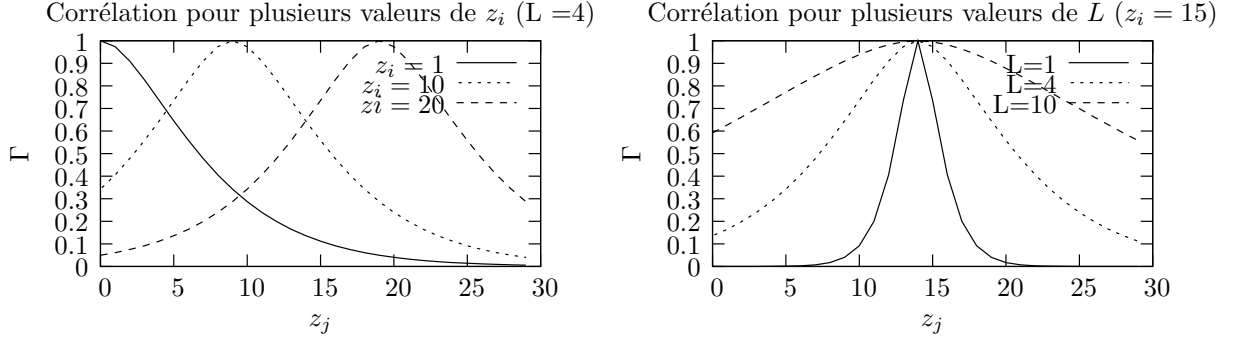


FIG. 4.3. Fonction de corrélation de Balgovind en fonction de z_i et de L .

Détermination de l'échelle de corrélation

Il s'agit à présent de régler l'échelle de corrélation L . L'ébauche de concentration xénon étant construite de la même façon que celle de l'iode, rien ne justifie le choix de deux échelles de corrélation différentes. Le choix du paramètre L a des répercussions sur

- la structure de \mathbf{B} (nombre d'éléments non nuls),
- le conditionnement de \mathbf{B} ,
- l'incrément d'analyse $\delta \mathbf{X}^a = \mathbf{X}^a - \mathbf{X}^b$.

On présente dans la figure 4.5, le remplissage progressif de la matrice \mathbf{B} lorsqu'on augmente l'échelle de corrélation. Pour $L = 0.01$, la corrélation spatiale est nulle ; la matrice \mathbf{B} est donc diagonale. Pour $L = 0.1$, chaque composante est seulement corrélée avec ses deux plus proches voisins. Pour $L = 0.5$, chaque composante est corrélée avec à peu près le tiers des autres composantes. Enfin à partir de $L = 2$, les composantes du vecteur d'erreur d'ébauche sont toutes corrélées entre elles mais le niveau de corrélation décroît cependant avec la distance.

Pour les applications où la taille du vecteur d'ébauche est importante, le remplissage de \mathbf{B} peut constituer un handicap en terme de place mémoire et de coût des opérations matricielles. Dans certaines applications de météorologie par exemple, la matrice \mathbf{B} n'est pas stockée : elle est considérée comme un opérateur dont les éléments sont calculés à la “volée” pour les produits matrice/vecteur. Les applications xénon traitées ici où $n = 60$, ne soulèvent pas de tels problèmes et donc en pratique, la matrice \mathbf{B} est stockée.

D'autre part, l'augmentation de l'échelle de corrélation conduit à une dégradation très rapide du conditionnement de \mathbf{B} (figure 4.6) par “étirement” du spectre de \mathbf{B} : les plus petites valeurs propres de \mathbf{B} diminuent tandis que les plus grandes augmentent lorsque L augmente. Il faut donc prendre garde à ne pas trop augmenter L sous peine de rendre la matrice \mathbf{B} proche de la singularité. Dans nos applications, il ne faut pas dépasser $L = 10$. En pratique, on prendra $L = 4$ (voir section 6.3).

On rappelle d'autre part qu'un moyen d'améliorer le conditionnement de \mathbf{B} consiste à utiliser des variables normalisées dans la formulation de la fonction coût.

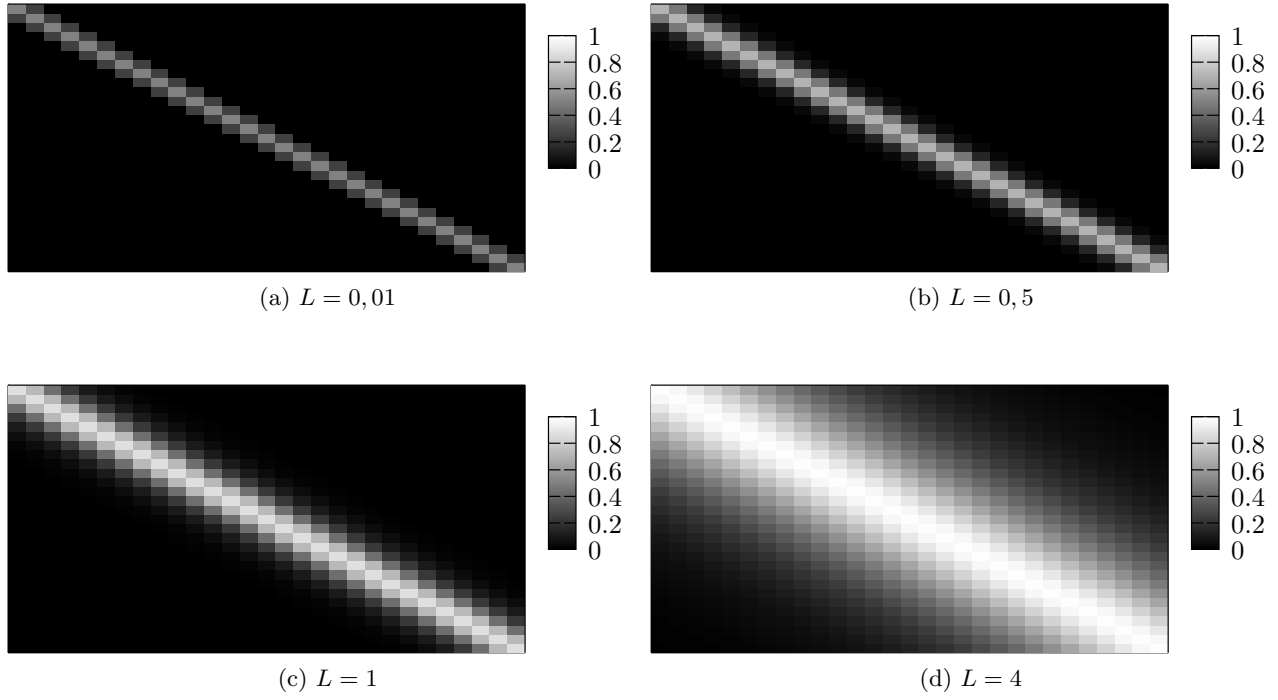


FIG. 4.4. Valeurs des éléments de la matrice de corrélation Γ_{X_e} pour différents choix du paramètre L .

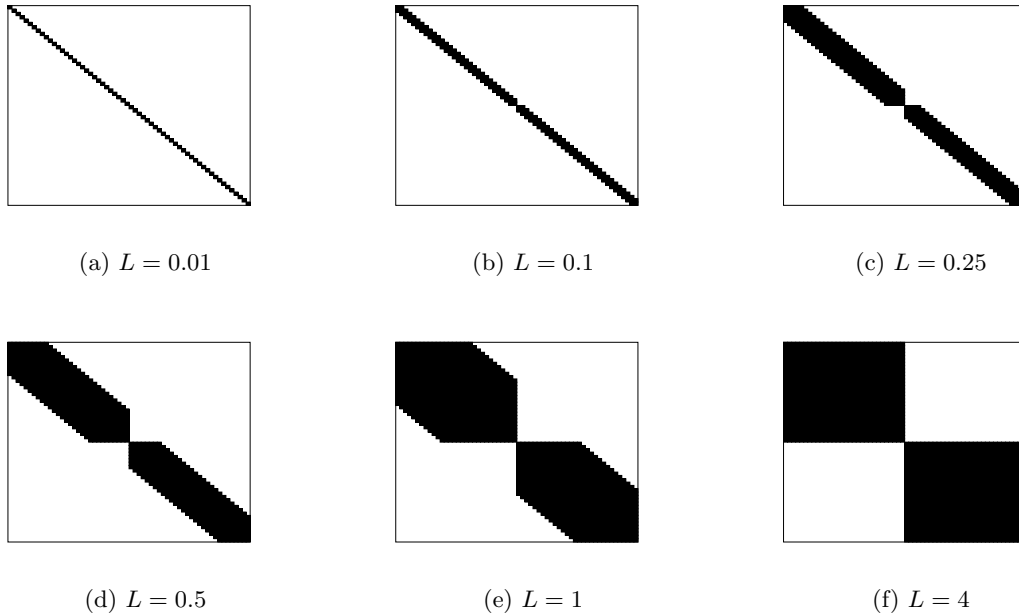


FIG. 4.5. Structure de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} en fonction de l'échelle de corrélation L . Sont représentés en noir les éléments de \mathbf{B} supérieurs à 10^{-8} .

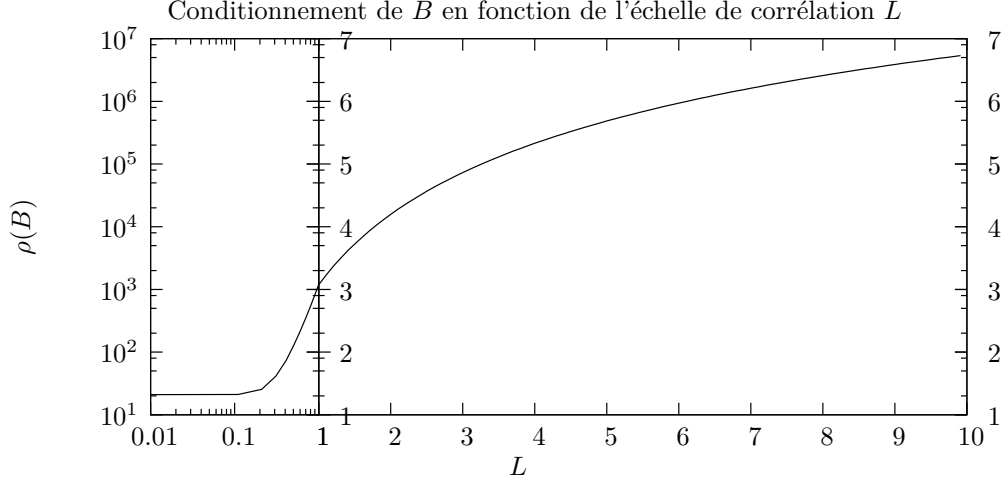


FIG. 4.6. Conditionnement de la matrice d'ébauche \mathbf{B} en fonction de l'échelle de corrélation L .

On présente dans le chapitre 6, section 6.3, l'importance du choix du paramètre L dans la qualité de l'analyse produite.

4.3 Mise en place du schéma

On vient de présenter les différents éléments du schéma 4DVAR : précision des espaces de contrôle et d'observation, construction des matrices de covariance d'erreur. Pour clore ce chapitre, on propose de décrire l'implémentation du schéma 4DVAR qui vient d'être présenté et on expose le résultat de premières expériences d'assimilation.

4.3.1 Expériences jumelles

Les expériences d'assimilation sont menées dans le cadre des expériences jumelles. Les expériences jumelles permettent de comparer la qualité des analyses produites par différents schémas d'assimilation en se plaçant dans un cadre idéal. Elles consistent à utiliser des observations obtenues non plus par mesure mais par calcul avec le modèle \mathcal{M} qu'implémente CIREP1D.

Les observations sont obtenues de la manière suivante :

1. on choisit un état initial de la dynamique à t_0 constituant l'état vrai $\mathbf{X}^t(t_0)$;
2. on calcule la trajectoire "vraie" issue de cet état initial en utilisant le modèle \mathcal{M} et définissant un terme de forçage \mathbf{u} (consignes de puissance et de position des grappes) :

$$\forall t_i \in [t_0; t_N], \mathbf{X}^t(t_i) = \mathcal{M}_{i,0}^{\mathbf{u}}(\mathbf{X}(t_0));$$

3. on calcule les observations en introduisant une erreur de mesure ϵ_i sur les observations "vraies" $\mathcal{H}(\mathbf{X}^t(t_i))$:

$$\mathbf{Y}_i^{obs} = \mathcal{H}(\mathbf{X}^t(t_i)) + \epsilon_i.$$

On fait le choix classique d'une erreur gaussienne : l'erreur ϵ_i suit la loi normale centrée de matrice de covariance R^{-1} quel que soit le temps d'observation (il n'y a pas ici de dépendance de la matrice de covariance au temps t_i d'observation).

L'ébauche est obtenue à partir d'une simulation antérieure calculée avec un terme de forçage $\tilde{\mathbf{u}}$ plus ou moins proche de la réalité (figure 4.7)

$$\mathbf{X}^b = \mathcal{M}(t_{-m}, t_0, \tilde{\mathbf{u}}(t_{-m}, \dots, t_0), \mathbf{X}(t_{-m})).$$

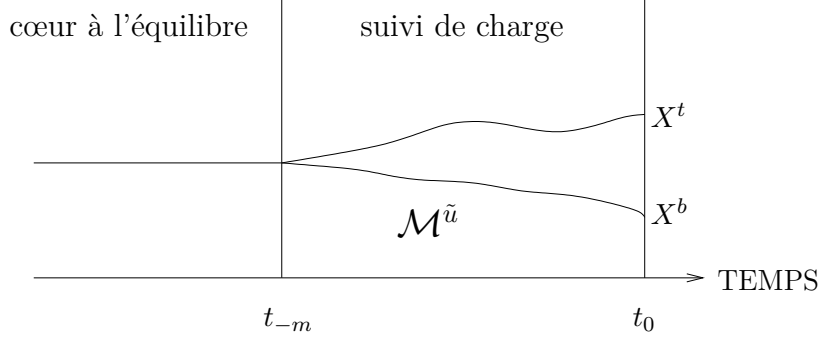


FIG. 4.7. Construction de l'état d'ébauche avec CIREP1D à partir d'un état à saturation en t_{-m} et d'un terme de forçage $\tilde{\mathbf{u}}$.

Dans l'ensemble des expériences menées, l'état $\mathbf{X}(t_{-m})$ est un état à saturation, c'est-à-dire qu'il correspond aux concentrations de xénon et d'iode à l'équilibre données en fonction du flux neutronique $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2)$:

$$\begin{cases} C_I^{eq}(z) = \frac{\gamma_I \Sigma_f(z) \Phi(z)}{\lambda_I}, \\ C_{Xe}^{eq}(z) = \frac{(\gamma_I + \gamma_{Xe}) \Sigma_f(z) \Phi(z)}{\lambda_{Xe} + \sigma_{Xe}(z) \Phi(z)}. \end{cases}$$

On rappelle que cet état à l'équilibre est obtenu après plusieurs jours de fonctionnement sans variation de puissance ni mouvement des barres.

On résume dans la figure 4.8 le mode expérimental permettant d'obtenir les termes d'ébauche et d'observation des expériences d'assimilation présentées dans la suite.

4.3.2 Implémentation dans PALM

Plateforme PALM

La chaîne d'assimilation 4DVAR a été réalisée avec le logiciel de couplage PALM (Projet d'Assimilation par Logiciel Multi-méthodes [Lag01][Bui06]) développé au CERFACS. PALM offre une plateforme pour la construction modulaire d'algorithmes pour l'assimilation de données. Dans PALM, un algorithme d'assimilation est décrit en terme de séquences d'unités élémentaires et de communications. Les unités élémentaires sont des sous-routines Fortran correspondant à une tâche particulière. L'opérateur d'observation, la matrice de covariance d'erreur d'ébauche peuvent ainsi constituer des unités élémentaires. Les communications correspondent aux échanges de données entre les unités ; elles peuvent être synchrones ou asynchrones et sont définies directement dans le PREPALM. PREPALM est une interface graphique qui vise à permettre l'agencement des

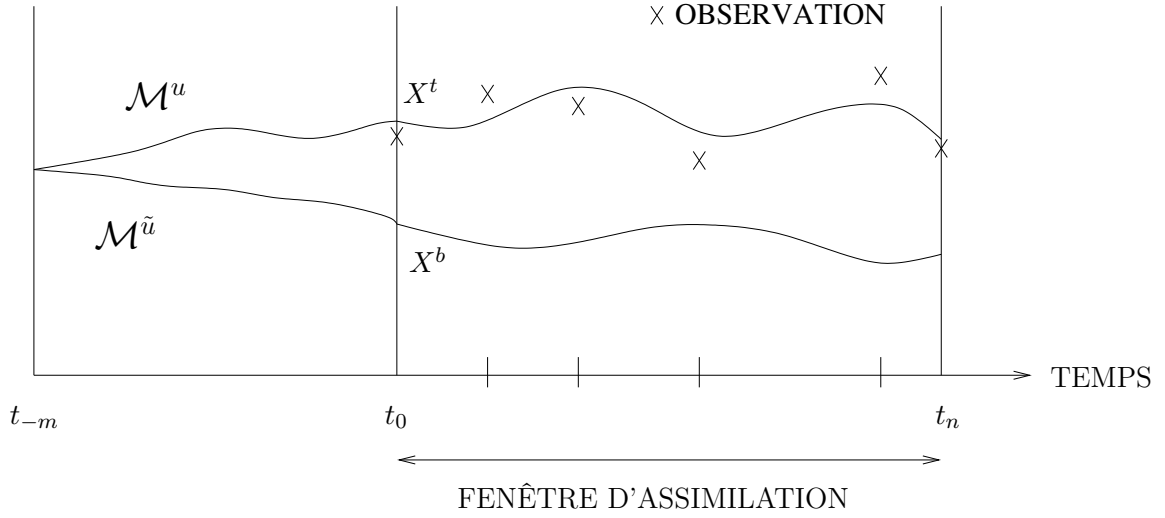


FIG. 4.8. Construction du terme d'ébauche et des observations dans le cadre des expériences jumelles : on part d'un état initial à saturation (temps t_{-m}) et on définit deux trajectoires distinctes en considérant deux termes de forçage différents (u pour la trajectoire de référence et \tilde{u} pour la trajectoire ébauche). Au temps t_0 , on obtient deux états différents dont l'un constitue la référence \mathbf{X}^t et l'autre le terme d'ébauche \mathbf{X}^b au temps t_0 . Les observations du système sont obtenues sur la période $[t_0; t_n]$ à partir de la trajectoire issue de l'état vrai \mathbf{X}^t en bruitant ou non les données (dans cette représentation schématique, les observations sont de même nature que le vecteur d'état).

unités et des communications comme dans un jeu de Lego[©]. Une fois défini le schéma dans le PREPALM, PALM construit le code informatique correspondant, en gérant les communications sous MPI et éventuellement les problèmes de synchronisation entre unités.

PALM est très peu intrusif. S'il l'on dispose déjà d'un programme Fortran implémentant par exemple le modèle physique du schéma d'assimilation, il est très rapide de le transformer en unité PALM. Il suffit de changer le mot-clé **program** en **subroutine** (sans argument) et de définir en entête du fichier principal la carte d'identité PALM de l'unité. Cette carte d'identité renseigne le nom de l'unité, ainsi que les données pouvant potentiellement être échangées avec d'autres unités : on précise leur type (entier, réel, tableau...) ainsi que leur fonction dans la subroutine (variable d'entrée ou de sortie).

L'approche modulaire de PALM permet de séparer le problème physique (comme le modèle ou l'opérateur d'observation) du problème d'assimilation (comme la construction des matrices de covariance d'erreur ou l'assemblage de la fonction coût du 4DVAR) et ainsi faciliter la mise en place de nouveaux algorithmes d'assimilation. PALM dispose d'unités algébriques prêtes à l'emploi pour faciliter l'assemblage des algorithmes (routines BLAS, LAPACK et même minimiseurs).

Caractéristiques du schéma implémenté

Le schéma d'assimilation de neutronique construit sous PALM permet de tester des expériences jumelles de type 3DVAR et 4DVAR sur une ou plusieurs fenêtres d'assimilation (l'analyse de la fenêtre précédente servant d'ébauche pour l'étape d'analyse de la fenêtre courante). Un fichier de données permet de préciser

- l'intervalle de temps de la simulation,
- le nombre d'observations et les temps d'observation,
- le nombre de fenêtres d'assimilation,
- la répartition des observations dans les fenêtres d'assimilation.

Les inverses et les factorisées (factorisation au sens de Cholesky) des matrices de covariance d'erreur sont lues dans des fichiers. Le vecteur d'ébauche peut également être donné par l'intermédiaire d'un fichier. Les observations sont construites à partir des observations vraies selon la formule suivante

$$\mathbf{Y}_i^{obs} = \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^t)) + \mathbf{R}^{1/2}\epsilon^{obs}$$

où le vecteur ϵ^{obs} de taille p suit la loi normale centrée réduite. Pour utiliser des mesures non bruitées, il suffit donc de fournir une matrice $\mathbf{R}^{1/2}$ nulle.

Selon les variantes, le schéma PALM utilise le modèle tangent ou le modèle adjoint de CIREP1D et les algorithmes de minimisation disponibles sont

- une méthode de type gradient non linéaire,
- une méthode de type quasi-Newton,
- une méthode de type Gauss-Newton.

Une comparaison de ces différents algorithmes pour la minimisation de la fonction coût du 4DVAR est proposée dans le chapitre 5.

4.3.3 Premières expériences d'assimilation

Avant d'aborder la description d'expériences d'assimilation pour la simulation des cœurs dans la partie III de ce mémoire, on propose ici quelques tests de validation du schéma 4DVAR. Les résultats de ces tests permettent par ailleurs de donner un aperçu de la sensibilité du système aux différents éléments le composant. Dans tous les cas tests, le vecteur de contrôle est composé des 30 valeurs de concentration du xénon et de l'iode aux noeuds du maillage du cœur actif et le vecteur d'observation est composé de 6 mesures de puissance intégrée, d'une mesure de l'axial offset de puissance et d'une mesure de la concentration en bore au temps d'observation.

Schéma avec observations exactes mais sans ébauche

En premier test, on souhaite s'assurer qu'il est possible de retrouver l'état vrai avec seulement des observations exactes (et en nombre suffisant) du système. Le schéma 4DVAR est basé sur une fenêtre d'assimilation d'une taille de 3 heures pour laquelle 8 temps d'observation sont fixés à intervalle régulier. Puisqu'il s'agit de contrôler 60 valeurs et que le vecteur des observations contient 8 mesures, le système est sur-déterminé. On n'introduit pas de terme d'ébauche : la fonction coût est seulement fonction des écarts aux observations. On donne dans la figure 4.9 les erreurs d'analyse pour le xénon et l'iode, rapportées à la norme euclidienne des concentrations vraies de xénon et d'iode.

Les erreurs sont suffisamment faibles pour qu'on puisse en déduire qu'il est possible de retrouver l'état initial à partir d'un jeu d'observation du système, c'est-à-dire que *le système ainsi défini est observable*. Dans le cadre d'une expérience plus réaliste où les observations ne sont pas exactes, l'ajout d'un terme d'ébauche doit permettre de compenser dans une certaine mesure les erreurs présentes dans les observations.

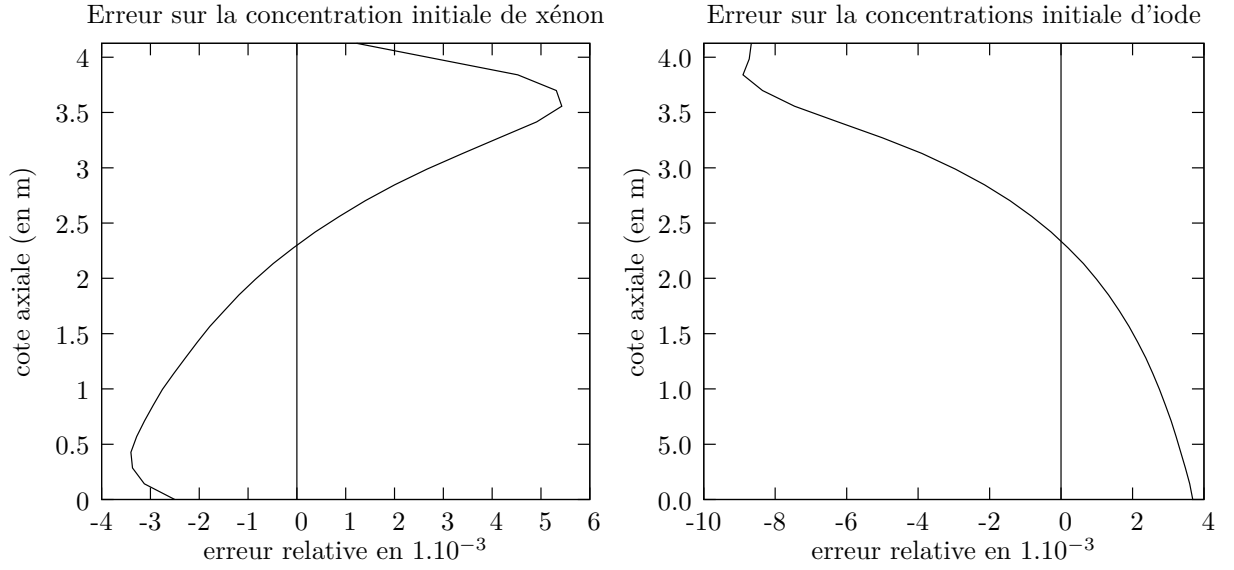


FIG. 4.9. Erreur relative de l'analyse de xénon et d'iode. Les observations sont exactes. Il n'y a pas de prise en compte de terme d'ébauche.

Ebauche et observations exactes

En second test, on propose de vérifier que l'analyse d'un schéma 4DVAR où l'ébauche est égale à l'état vrai et les observations sont exactes, correspond à l'état vrai. Le schéma 4DVAR est toujours basé sur une fenêtre d'assimilation d'une taille de 3 heures pour laquelle 8 temps d'observation sont fixés. La matrice d'erreur d'ébauche \mathbf{B} ne comporte pas de termes de corrélation spatiale (\mathbf{B} est donc diagonale). L'erreur d'analyse est calculée en norme euclidienne dans chaque maille du maillage 1D de CIREP1D. On donne dans la figure 4.10 les erreurs d'analyse pour le xénon et l'iode, rapportées à la norme euclidienne des concentrations vraies de xénon et d'iode.

Ces erreurs sont suffisamment faibles compte tenu du critère d'arrêt de l'algorithme de minimisation, pour en conclure que l'analyse obtenue correspond à l'état vrai. On peut remarquer cependant deux points :

- L'erreur d'analyse pour l'iode est un peu plus importante que l'erreur d'analyse pour le xénon. Dans ce cas test, la concentration initiale d'iode ne paraît pas être contrôlée de la même manière que la concentration initiale de xénon.
- L'erreur n'est pas spatialement homogène : pour le xénon par exemple, l'erreur est positive dans la moitié supérieure du cœur tandis qu'elle est négative dans la moitié inférieure.

Pour approfondir un peu plus la deuxième remarque, on donne dans la figure 4.11 l'évolution de l'incrément d'analyse au cours du processus de minimisation. L'algorithme de minimisation utilisé ici est un algorithme de type quasi-Newton (LBFGS) qui converge pour ce cas test en 10 itérations. On constate pour le xénon que l'on converge beaucoup plus vite dans la moitié inférieure que dans la moitié supérieure du cœur. Pour l'iode, la convergence semble plus également répartie entre les deux moitiés du cœur.

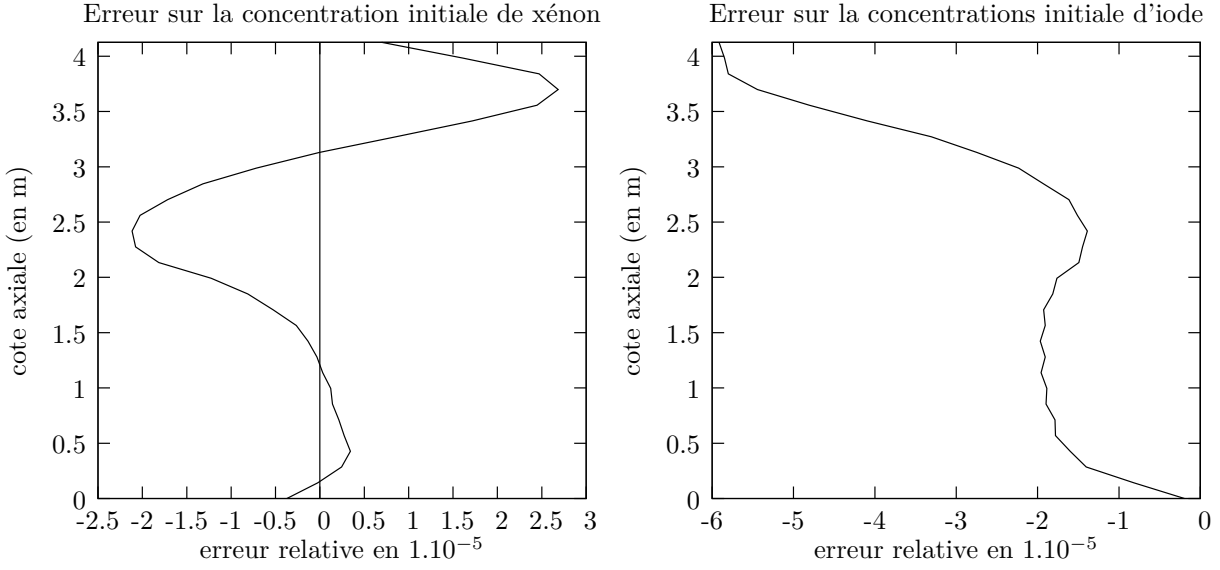


FIG. 4.10. Erreur relative de l'analyse de xénon et d'iode. Les observations sont exactes, l'ébauche est prise égale à l'état initial vrai. Il n'y a pas de prise en compte des corrélations spatiales dans la matrice B .

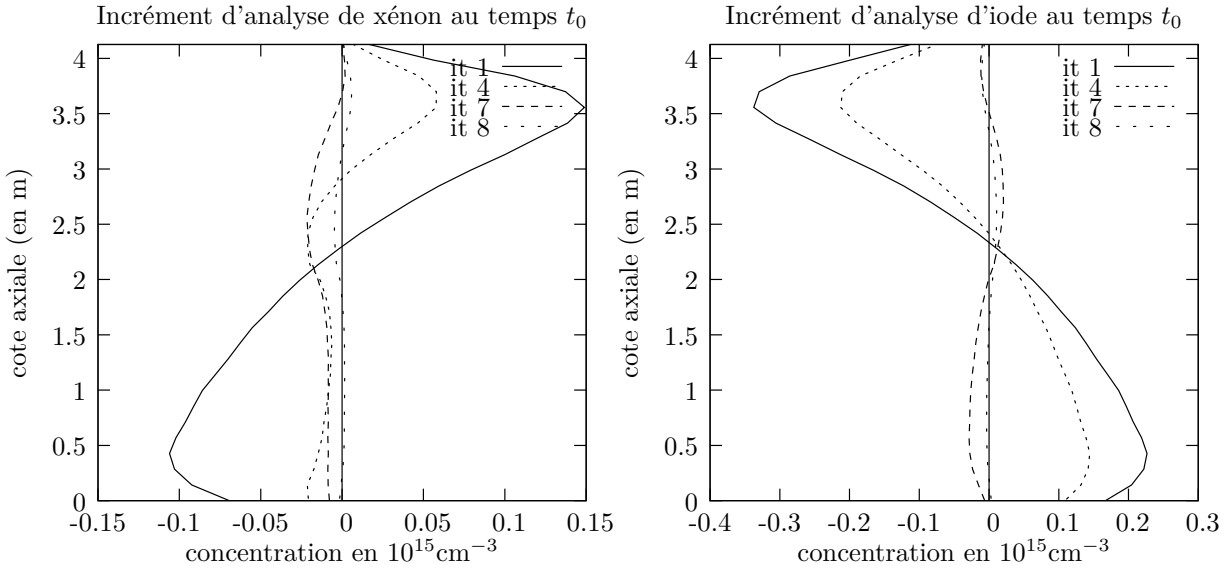


FIG. 4.11. Incréments pour les concentrations initiales de xénon et d'iode au cours de la minimisation (convergence en 10 itérations avec l'algorithme LBFGS). Les observations sont exactes, l'ébauche est prise égale à l'état initial vrai. L'incrément exact est donc nul. Il n'y a pas de prise en compte des corrélations spatiales dans la matrice B .

Poids des observations

On propose à présent de relâcher la qualité des observations pour observer la dégradation de la qualité de l'analyse. On présente dans la figure 4.12 les incréments d'analyse de trois expériences où l'ébauche est toujours prise égale à l'état vrai mais où on relâche progressivement la qualité des mesures. Dès qu'on introduit des erreurs dans les observations, on constate qu'il n'est plus possible de retrouver exactement l'état vrai et ce, même si l'ébauche correspond à l'état vrai ! Par contre, la dégradation de la qualité de l'incrément d'analyse n'est pas proportionnelle aux erreurs introduites dans les observations : les incréments d'analyse de l'expérience avec le triplet d'erreurs (30%, 10% et 1%) sont de 2 à 3 fois plus élevés que ceux de l'expérience avec 0.5% d'erreur sur toutes les observations (on rappelle que l'incrément vrai est nul). D'autre part, on remarque à nouveau que les incréments d'analyse ont des valeurs différentes selon qu'on se situe en haut, en bas ou au milieu du cœur.

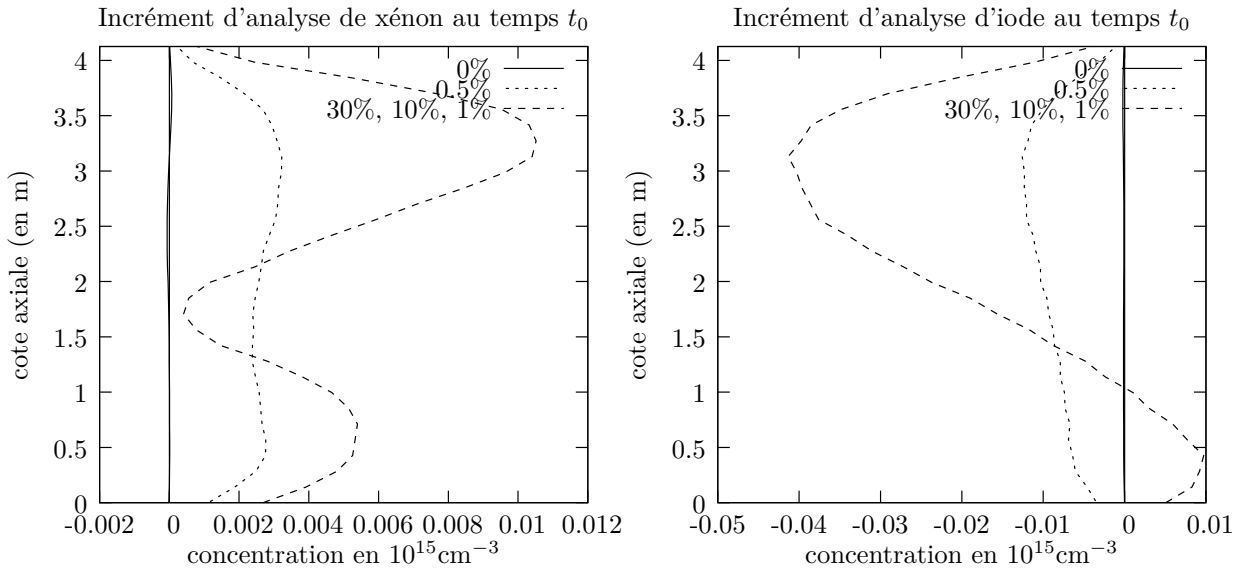


FIG. 4.12. Incréments d'analyse en fonction du bruit introduit dans les observations : 0% correspond à des observations exactes, 0.5% correspond à un bruitage des observations de l'ordre de 0.5% et le troisième cas correspond à un bruitage de 30% sur les mesures de puissance intégrée, de 10% sur les mesures de l'axial offset puissance et de 1% sur les concentrations en bore.

Synthèse

On propose une courte synthèse des expériences qui viennent d'être présentées :

- dès que les observations sont bruitées il n'est pas possible de retrouver exactement l'état vrai, même si l'ébauche est très bonne ;
- le xénon et l'iode réagissent de manière différente dans le processus d'analyse ;
- au vu des incréments d'analyse présentés, on observe la présence de corrélations spatiales entre les différentes composantes des vecteurs 1D de concentrations.

Ces points vont être repris et complétés dans le chapitre 6.

Minimisation de la fonction coût du 4DVAR

L'assimilation variationnelle consiste à rechercher un état initial qui minimise une fonction coût mesurant, sur un intervalle de temps donné, l'écart entre les observations et la trajectoire issue de l'ébauche. Le problème de minimisation qui en résulte peut être de nature quadratique ou non linéaire. Il est généralement résolu par un algorithme itératif qui recherche un point annulant le gradient de la fonction coût. Le nombre d'itérations nécessaire à la convergence de l'algorithme détermine le coût de calcul de l'analyse (à travers le coût des évaluations de la fonction coût) et donc la faisabilité de la méthode d'assimilation. Il est donc très important de rechercher l'algorithme de minimisation le mieux adapté aux caractéristiques numériques du système d'assimilation.

L'objectif de ce chapitre est donc de tester et de comparer pour notre application, les différents algorithmes de minimisation utilisés dans la communauté de l'assimilation de données, à savoir : l'algorithme du gradient non-linéaire, l'algorithme de LBFGS (algorithme de type quasi-Newton) et l'algorithme de Gauss-Newton. On s'attache dans une première partie à décrire les propriétés numériques du système d'assimilation pour la dynamique xénon construit au chapitre 4 (section 5.1). On s'intéresse notamment à la non-linéarité de la fonction coût et au conditionnement de la matrice hessienne de cette dernière. Dans la section 5.2, on esquisse une étude du comportement général des algorithmes de minimisation appliqués à notre problème. On propose, dans la section 5.3, de comparer l'efficacité des trois algorithmes cités plus haut sur trois cas tests. Les deux premiers cas tests correspondent à des systèmes d'assimilation proches, du point de vue numérique, de ceux traités dans les chapitres 7 et 8 de la partie III. Le troisième cas test a été construit dans le but de tester la robustesse des différents algorithmes de minimisation. Il correspond à un système d'assimilation presque exclusivement piloté par les observations.

On décrit brièvement, dans la section 5.3, les algorithmes du gradient, de quasi-Newton et Gauss-Newton. Pour des informations plus approfondies sur ces algorithmes, on peut consulter les ouvrages de J.F Bonnans [Bon97], de M. Ghil [Ghi82] et de J. Nocedal et S.J. Wright [Noc99].

5.1 Propriétés numériques du système variationnel

On rappelle qu'on note $\mathcal{M}_{i,0}$ l'opérateur de dynamique xénon qui permet d'obtenir les concentrations xénon et iode au temps t_i , à partir d'un état \mathbf{X} des concentrations xénon et iode au temps t_0 :

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{i,0} : \mathbf{R}^n &\rightarrow \mathbf{R}^n \\ \mathbf{X}(t_i) &\mapsto \mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}(t_0)).\end{aligned}$$

L'opérateur d'observation reliant à tout instant l'espace des vecteurs d'état à celui des vecteurs d'observation est noté \mathcal{H} :

$$\begin{aligned}\mathcal{H} : \mathbf{R}^n &\rightarrow \mathbf{R}^p \\ \mathbf{X}(t_i) &\mapsto \mathcal{H}(\mathbf{X}(t_i)).\end{aligned}$$

Le code CIREP1D présenté au chapitre 3 implémente à la fois le modèle $\mathcal{M}_{i,0}$, l'opérateur d'observation \mathcal{H} et la composition $\mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0})$. La dimension des vecteurs d'état et d'observation est respectivement de 60 et 8. Dans notre application xénon, l'opérateur d'observation ne dépend pas du temps (il en est de même pour la matrice de covariance d'erreur d'observation \mathbf{R}). On rappelle que l'opérateur d'observation correspond à un pas de temps du modèle de dynamique (calcul de recherche de bore critique à concentration xénon imposée).

On identifie par la notation \mathcal{J} , la fonction coût non linéaire du 4DVAR

$$\mathcal{J}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{nobs-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \right)^T \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \right),$$

et par la notation J , la fonction coût quadratique pour laquelle les opérateurs \mathcal{H} et $\mathcal{M}_{i,0}$ sont linéarisés au point \mathbf{X}_g :

$$\begin{aligned}J_{|\mathbf{X}_g}(\mathbf{X}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{nobs-1} \left(\mathbf{d}_{i,0} - \mathbf{H}_{|\mathbf{X}_g} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}_g}(\mathbf{X} - \mathbf{X}_g) \right)^T \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{d}_{i,0} - \mathbf{H}_{|\mathbf{X}_g} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}_g}(\mathbf{X} - \mathbf{X}_g) \right).\end{aligned}$$

Le vecteur $\mathbf{d}_{i,0}$ est défini par

$$\mathbf{d}_{i,0} = \mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})),$$

et les matrices $\mathbf{H}_{|\mathbf{X}_g}$ et $\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}_g}$ correspondent respectivement aux linéaires tangents des opérateurs d'observation et de dynamique au point \mathbf{X}_g .

On introduit les fonctions coût \mathcal{J}^b et \mathcal{J}^{obs} liées respectivement à l'ébauche et aux observations :

$$\begin{aligned}\mathcal{J}^b(X) &= \frac{1}{2}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{X} - \mathbf{X}^b), \\ \mathcal{J}^{obs} &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{nobs-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \right)^T \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X})) \right).\end{aligned}$$

Le système d'assimilation construit au chapitre précédent consiste à contrôler un vecteur d'état dans \mathbb{R}^{60} en assimilant des observations dans \mathbb{R}^8 . Il s'agit donc d'un système variationnel de taille moyenne : le coût des opérations algébriques et le stockage des matrices ne sont pas rédhibitoires. Pour ce système, le coût des opérations algébriques est considéré inférieur au coût d'évaluation de la fonction coût et du gradient.

Différentes caractéristiques du système d'assimilation sont à prendre en compte dans la recherche d'un algorithme de minimisation performant :

- la taille du système : est-ce que les opérations algébriques coûtent cher ? Le stockage des matrices est-il possible ?
- la non-linéarité du système : la fonction coût est-elle faiblement ou fortement non linéaire ?
- le conditionnement de la matrice hessienne : peut-on privilégier des algorithmes peu coûteux mais dont la performance est sensible à la dégradation du conditionnement de la matrice hessienne ?

Alors que le premier item est plus ou moins fixé (on peut toujours chercher à diminuer la taille du vecteur de contrôle en recherchant l'incrément d'analyse dans un espace plus restreint), les deux autres items dépendent du modèle et du système d'assimilation mis en place (matrices de covariance d'erreur, taille de la fenêtre par exemple). Mais les différentes composantes du modèle et du système n'ont pas toutes la même importance : on constate dans la suite que le paramètre le plus influent sur la forme et le conditionnement de la fonction coût de notre application xénon est le poids relatif de l'ébauche par rapport aux observations.

5.1.1 Étude de la non-linéarité du modèle et de la fonction coût

On souhaite montrer sur quelques exemples le comportement du modèle et de la fonction coût. On veut notamment mettre en évidence le domaine de validité en espace et en temps du modèle linéarisé et présenter la forme de la fonction coût dans une direction donnée.

Domaine de validité du régime linéaire du modèle

Dans la figure 5.1, on étudie la variation des erreurs commises en linéarisant dans la direction $\alpha\delta\mathbf{X}$ les opérateurs $\mathcal{M}_{i,0}$ et $\mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0})$ autour du point d'ébauche \mathbf{X}^b :

$$\epsilon_{\mathcal{M}_{i,0}}(\alpha) = \frac{\|\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \alpha\delta\mathbf{X}) - \mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b) - \alpha\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}^b}\delta\mathbf{X}\|_2}{\|\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \alpha\delta\mathbf{X})\|_2}$$

$$\epsilon_{\mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0})}(\alpha) = \frac{\|\mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \alpha\delta\mathbf{X})) - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b)) - \alpha\mathbf{H}_{|\mathbf{X}^b}\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}^b}\delta\mathbf{X}\|_2}{\|\mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \alpha\delta\mathbf{X}))\|_2}.$$

où la norme $\|\cdot\|_2$ est la norme euclidienne. L'ébauche \mathbf{X}^b et la direction $\delta\mathbf{X}$ correspondent respectivement à l'ébauche et à la première direction calculée par l'algorithme de gradient non linéaire du cas test 2 présenté en 5.3. On constate que l'évolution de l'erreur est de nature quadratique. À partir d'une variation de l'ordre du 1% sur le point de linéarisation, l'erreur commise en utilisant le modèle linéaire plutôt que le modèle non linéaire risque d'être du même ordre de grandeur que l'erreur d'observation : dans ce cas, la fonction coût J quadratique est une approximation grossière de \mathcal{J} . En pratique, lors des recherches linéaires des algorithmes de minimisation, le pas de descente calculé est relativement petit (inférieur à ce 1%). L'approximation linéaire est alors acceptable.

On souhaite à présent montrer que la non-linéarité du modèle dépend de l'intervalle de temps d'intégration. La figure 5.2 représente l'évolution des erreurs de linéarisation en fonction de la taille de l'intervalle de temps considéré. La direction de linéarisation choisie correspond également à la première direction de descente calculée par l'algorithme de gradient non linéaire. On constate que l'évolution de ces erreurs est irrégulière. Pour des intervalles de temps inférieurs à

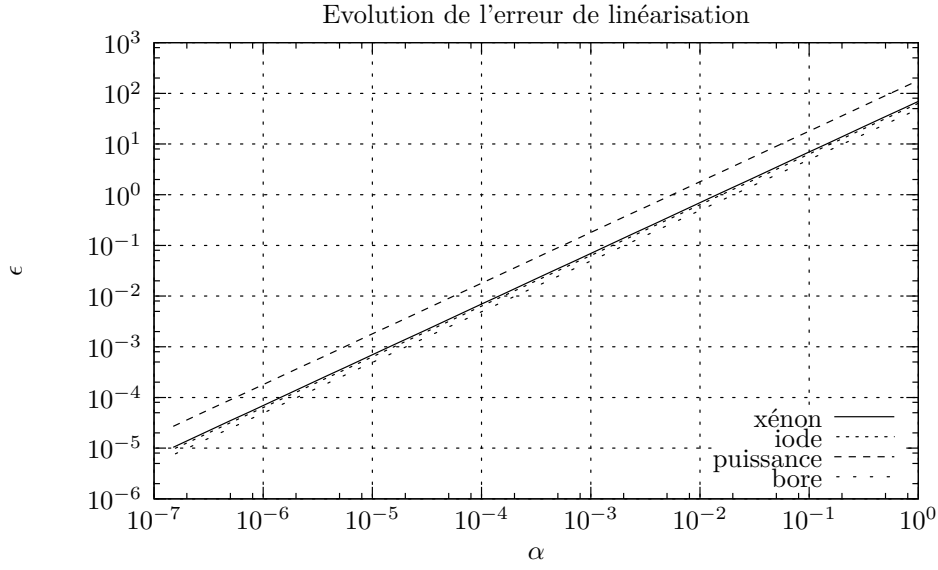


FIG. 5.1. Évolution en fonction du scalaire α , de l'erreur ϵ de linéarisation pour le modèle (décomposée en erreur xénon et erreur iode) et pour l'opérateur d'observation (ici représentées, l'erreur sur la puissance intégrée et la concentration en bore).

2 heures, les erreurs étudiées sont relativement proches. Pour des intervalles de temps compris entre 2 heures et 8 heures, les erreurs de linéarisation xénon et iode croissent bien plus vite que celle des puissances : l'erreur de linéarisation du modèle est donc amoindrie par l'opérateur d'observation pour ces intervalles de temps. Au-delà d'un intervalle de temps de 8 heures, on atteint des erreurs de linéarisation entre 10 et 20% sur les quantités évaluées.

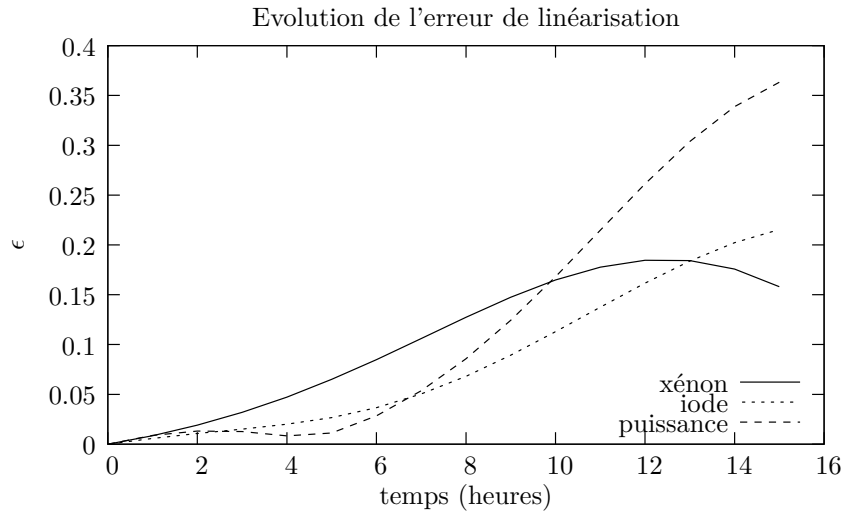


FIG. 5.2. Évolution des erreurs de linéarisation en fonction de l'intervalle de temps intégré par le modèle. On a décomposé l'erreur modèle en erreur xénon et erreur iode. Le pas de linéarisation α est de l'ordre de 2.5×10^{-2} .

En résumé : Certains algorithmes de minimisation comme le gradient non linéaire utilisent, pour calculer les itérés \mathbf{X}_k , une approximation linéaire de la fonction à minimiser. Pour nos applications, on a constaté que les approximations linéaires sont réalisées dans un voisinage proche de l'itéré courant (α entre 10^{-1} et 10^{-2}). On vient de voir que dans un tel voisinage, l'approximation linéaire est valide. D'autre part, ces expériences montrent que sa validité dépend également de l'intervalle de temps intégré dans le modèle. Ce dernier point n'est cependant pas toujours déterminant dans la forme de la fonction coût. En effet, si le poids de l'ébauche est bien supérieur au poids des observations dans le système d'assimilation, la non-linéarité du modèle et de l'opérateur d'observation est moins pénalisante pour le succès de la minimisation.

Fonction coût

De nombreux algorithmes de minimisation, comme le gradient non linéaire et le quasi-Newton, comportent une étape de minimisation dans \mathbb{R} : à partir de l'itéré \mathbf{X}_k et d'une direction de descente \mathbf{p}_k déjà calculés, on recherche un réel α minimisant la fonction scalaire ϕ définie par :

$$\alpha \rightarrow \phi(\alpha) = \mathcal{J}(\mathbf{X}_k + \alpha \mathbf{p}_k).$$

Cette minimisation dans \mathbb{R} n'est généralement pas menée jusqu'à convergence : on se contente souvent d'un réel α approchant suffisamment près le vrai minimum α^* .

On donne dans les figures 5.3 et 5.4, le tracé de cette fonction pour deux situations différentes. La première correspond à un système d'assimilation où l'ébauche est prépondérante. On remarque dans la figure 5.3, que le minimum de ϕ est proche de celui de la fonction quadratique $J^b(\mathbf{X}) + \mathcal{J}^{obs}(\mathbf{X}_k)$. Cette caractéristique est favorable à une minimisation efficace. La figure 5.4 correspond à un système d'assimilation où les observations sont prépondérantes. On constate dans la figure 5.4 que la fonction ϕ a des variations beaucoup plus élevées autour du minimum. Cette caractéristique peut conduire à calculer des itérés qui sortent du domaine de validité du modèle implémenté dans CIREP1D. **Quel que soit l'algorithme de minimisation, si l'initialisation est effectuée trop loin du minimum, la minimisation peut échouer à cause du modèle.**

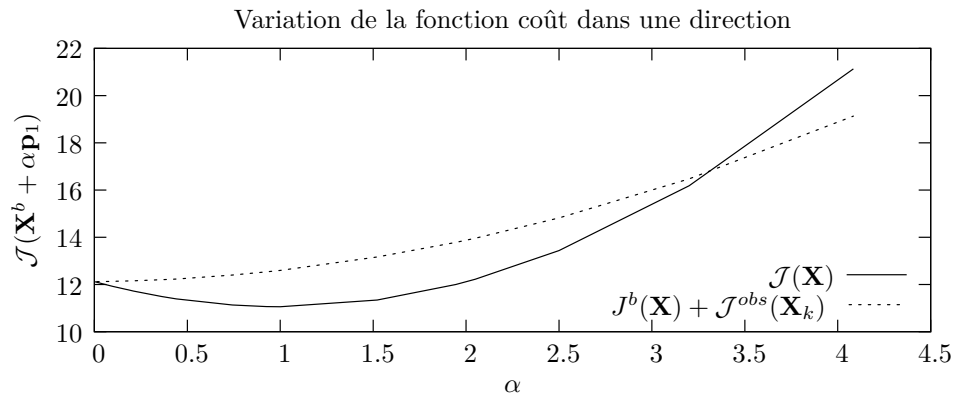


FIG. 5.3. Tracé de la fonction scalaire $\phi(\alpha)$. L'ébauche est prépondérante dans la fonction coût. Le minimum de ϕ est proche de celui de la fonction quadratique $J^b(\mathbf{X}) + \mathcal{J}^{obs}(\mathbf{X}_k)$.

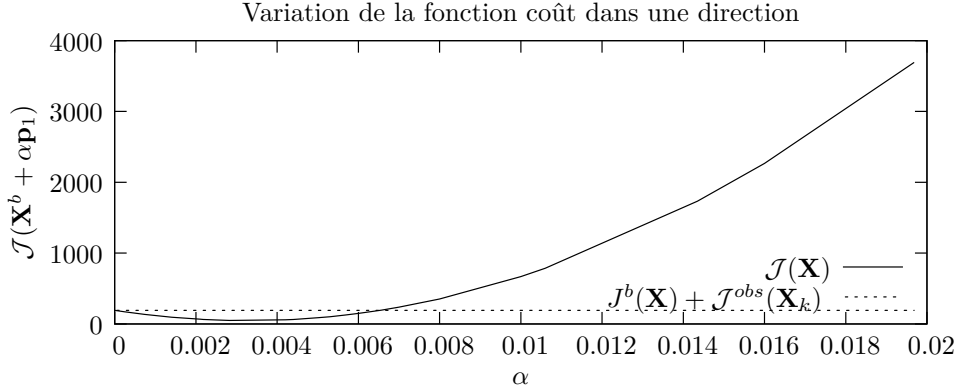


FIG. 5.4. Tracé de la fonction scalaire $\phi(\alpha)$. Les observations sont prépondérantes dans la fonction coût. Le minimum de ϕ ne correspond pas à celui de la fonction quadratique $J^b(\mathbf{X}) + J^{obs}(\mathbf{X}_k)$.

5.1.2 Conditionnement et préconditionnement

Vitesse de convergence

La principale mesure de l'efficacité d'un algorithme de minimisation est sa vitesse de convergence. On peut définir différents types de convergence. On s'intéresse dans la suite à la convergence linéaire. On dit que la vitesse de convergence d'un algorithme itératif est linéaire s'il existe un réel $0 < r < 1$ tel que pour k suffisamment grand :

$$\frac{\|\mathbf{X}_{k+1} - \mathbf{X}^*\|}{\|\mathbf{X}_k - \mathbf{X}^*\|} \leq r. \quad (5.1)$$

Plus le réel r est petit, plus la vitesse de convergence est élevée.

En pratique, ce réel r dépend généralement⁷ des caractéristiques de la fonction qu'on minimise et notamment, du conditionnement et de la distribution des valeurs propres de sa matrice hessienne à l'optimum. Le conditionnement $\kappa(\mathbf{A})$ d'une matrice \mathbf{A} est défini par :

$$\kappa(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_2 \|\mathbf{A}^{-1}\|_2,$$

où la norme matricielle $\|\mathbf{A}\|_2$ de \mathbf{A} correspond à la racine de la plus grande valeur propre du produit $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$. On note $\kappa(\nabla^2 \mathcal{J}^*)$ le conditionnement de la matrice hessienne à l'optimum $\nabla^2 \mathcal{J}^*$ de \mathcal{J} (ce minimum correspond, dans le vocabulaire de l'assimilation, à l'analyse notée \mathbf{X}^a). Dans un cadre quadratique, on peut montrer, par exemple, que la vitesse de convergence de l'algorithme du gradient est linéaire et qu'on a la majoration suivante [Noc99] :

$$\frac{\|\mathbf{X}_{k+1} - \mathbf{X}^*\|_{\nabla^2 \mathcal{J}^*}}{\|\mathbf{X}_k - \mathbf{X}^*\|_{\nabla^2 \mathcal{J}^*}} \leq \left(\frac{\sqrt{\kappa(\nabla^2 \mathcal{J}^*)} - 1}{\sqrt{\kappa(\nabla^2 \mathcal{J}^*)} + 1} \right)^2$$

Cette majoration n'est souvent pas optimale mais elle permet de déduire que plus le conditionnement de la matrice hessienne est élevé, plus la vitesse de convergence est potentiellement lente.

⁷Ce n'est pas le cas pour l'algorithme de Gauss-Newton, avec une résolution direct de l'étape linéaire, appliqué à la minimisation d'une fonction quadratique.

Dans un cadre général, il n'existe pas de tel résultat quand le point d'initialisation est éloigné de la solution. Le conditionnement de la matrice hessienne reste cependant une indication sur la vitesse de convergence de la minimisation lorsque les itérés sont suffisamment proches du minimum.

Conditionnement de la matrice hessienne

On vient de voir que la vitesse de convergence des algorithmes de minimisation est souvent reliée au conditionnement de la matrice hessienne de la fonction à minimiser. On veut vérifier que le conditionnement de la matrice hessienne de la fonction coût du 4DVAR est lié au transitoire modélisé et au système d'assimilation mis en place.

La matrice hessienne de la fonction coût au point \mathbf{X} est donnée par

$$\nabla^2 \mathcal{J}(\mathbf{X}) = \mathbf{B}^{-1} + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}}) + \mathbf{Q}.$$

Les matrices $\mathbf{H}_{|\mathbf{X}}$ et $\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}}$ représentent respectivement les linéaires tangents au point \mathbf{X} des opérateurs d'observation \mathcal{H} et de dynamique $\mathcal{M}_{i,0}$ entre les instants t_0 et t_i . La matrice \mathbf{Q} contient les dérivées secondes de \mathcal{H} et $\mathcal{M}_{i,0}$. Il est trop onéreux de calculer le terme d'ordre 2 \mathbf{Q} et on trouve l'approximation suivante :

$$\nabla^2 \mathcal{J}(\mathbf{X}) \approx \mathbf{B}^{-1} + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}}). \quad (5.2)$$

Le conditionnement $\kappa(\nabla^2 \mathcal{J}^*)$ de la matrice hessienne au point d'analyse \mathbf{X}^a est fonction de plusieurs facteurs :

- le transitoire modélisé :** On donne, dans la figure 5.5, l'évolution du conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} au point \mathbf{X}^b (sensiblement identique à celui au point d'analyse \mathbf{X}^a) en fonction de la taille de la fenêtre d'assimilation. Trois transitoires sont étudiés : ils correspondent respectivement aux trois transitoires décrits dans les chapitres 6, 7 et 8. Seulement deux temps d'observation sont pris en compte. On constate que le conditionnement varie d'un facteur 4 en fonction du transitoire.
- la taille de la fenêtre d'assimilation :** On voit, dans la figure 5.5, que le conditionnement atteint une valeur minimum pour une fenêtre de quelques heures. Dans le chapitre 6, on constate que les réglages optimaux du système d'assimilation (taille de la fenêtre entre autres) sont reliés aux constantes de décroissance radioactive du xénon et de l'iode.
- le nombre d'observations :** On représente, dans la figure 5.6, l'évolution du conditionnement en fonction du nombre d'observations sur une fenêtre de 6 heures. On remarque que l'introduction d'observations supplémentaires permet d'améliorer le conditionnement avec une nette progression jusqu'à 5 séries d'observations puis une progression plus lente au-delà (c'est-à-dire lorsque le système est presque déterminé en observations).
- la confiance relative dans l'ébauche et les observations :** On donne dans la figure 5.7, le conditionnement de la matrice hessienne en fonction de l'écart-type $\sigma_{\mathbf{R}}$ utilisé dans la construction de la matrice de covariance d'erreur d'observation \mathbf{R} . On observe que plus on donne de confiance aux observations, plus le conditionnement se dégrade. A l'opposé, plus la confiance dans les observations est faible, plus le conditionnement de la matrice hessienne se rapproche du conditionnement de la matrice \mathbf{B}^{-1} .

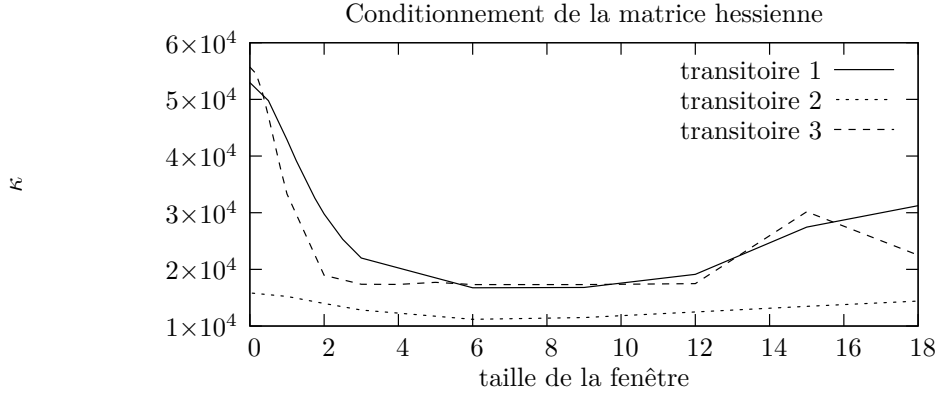


FIG. 5.5. Conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} au point \mathbf{X}^b en fonction de la taille de la fenêtre d'assimilation et pour trois transitoires (décrits respectivement dans les chapitres 6, 7 et 8). Seulement deux séries d'observation sont prises en compte dans la fenêtre.

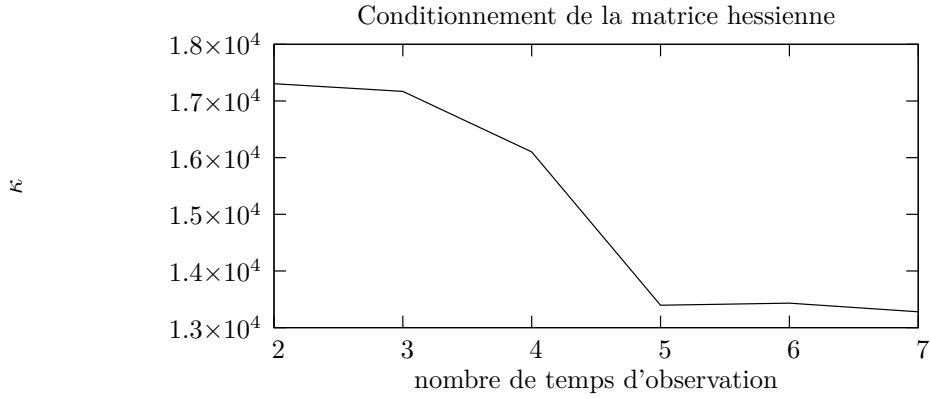


FIG. 5.6. Conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} au point \mathbf{X}^b en fonction du nombre d'observations. La fenêtre d'assimilation est de 6 heures. Le transitoire est décrit au chapitre 8.

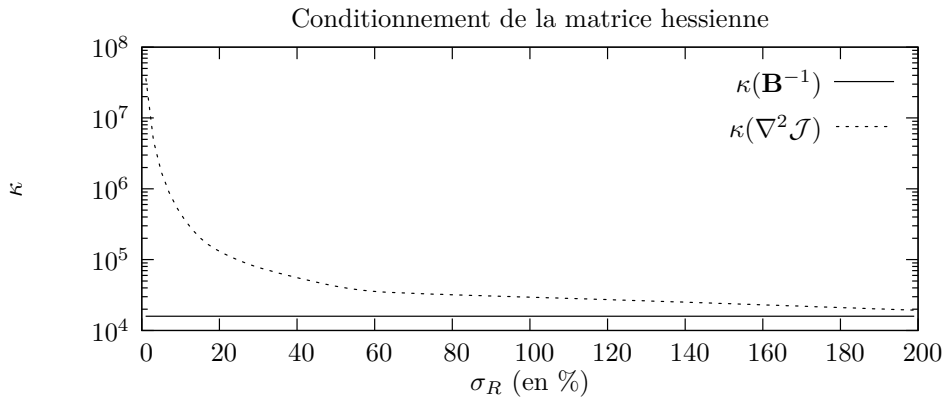


FIG. 5.7. Conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} au point \mathbf{X}^b en fonction de la confiance accordée aux observations (paramètre σ_R). La matrice \mathbf{B} est par ailleurs fixée. Le transitoire modélisé est décrit au chapitre 7.

En résumé : Il est possible d'améliorer le conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} en faisant certains choix dans la construction du système d'assimilation. On peut noter que c'est le poids relatif des observations par rapport à l'ébauche qui joue un rôle déterminant dans le conditionnement du système (variation du conditionnement de plusieurs ordres de grandeur lorsque $\sigma_{\mathbf{R}}$ varie entre 1% et 30%). Même dans le cas le plus favorable, ce conditionnement reste néanmoins trop élevé pour disposer d'algorithmes de minimisation performants.

Préconditionnement du problème d'assimilation

On cherche à preconditionner la fonction coût pour accélérer la vitesse de convergence des algorithmes. Puisque la matrice \mathbf{B} est de petite taille, il est possible de calculer le factorisé de Cholesky, noté $\mathbf{B}^{1/2}$, pour l'utiliser comme preconditionneur. On rappelle que le factorisé de Cholesky $\mathbf{B}^{1/2}$ vérifie

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}^{1/2} \mathbf{B}^{T/2},$$

où $\mathbf{B}^{T/2}$ désigne le transposé de $\mathbf{B}^{1/2}$. On note $\mathbf{B}^{-1/2}$ la matrice définie par :

$$\mathbf{B}^{-1/2} = (\mathbf{B}^{1/2})^{-1}.$$

Au lieu de chercher à minimiser $\mathcal{J}(\mathbf{X})$, on cherche à minimiser $\mathcal{J}(\mathbf{U})$ où $\mathbf{U} = \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{X}$. Avec ce changement de variable, la fonction coût du 4DVAR s'écrit :

$$\mathcal{J}(\mathbf{U}) = \frac{1}{2}(\mathbf{U} - \mathbf{U}^b)^T(\mathbf{U} - \mathbf{U}^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U})) \right)^T \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U})) \right)$$

où $\mathbf{U}^b = \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{X}^b$. Le gradient de \mathcal{J} par rapport à \mathbf{U} s'écrit :

$$\nabla_{\mathbf{U}} \mathcal{J}(\mathbf{U}) = \mathbf{U} - \mathbf{U}^b - \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U}} \mathbf{M}_{i,0} |\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U} \mathbf{B}^{1/2})^T \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U})) \right),$$

et la matrice hessienne au premier ordre est donnée par :

$$\nabla^2 \mathcal{J}(\mathbf{U}) = \mathbf{Id} + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U}} \mathbf{M}_{i,0} |\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U} \mathbf{B}^{1/2})^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}_{|\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U}} \mathbf{M}_{i,0} |\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U} \mathbf{B}^{1/2}.$$

Ce preconditionnement présente l'avantage d'écrire la fonction coût sous la forme d'une somme de deux termes dont le premier est un produit scalaire idéalement conditionné. En revanche, l'ajout de nouveaux termes d'observation ne peut qu'accroître le conditionnement de $\nabla^2 \mathcal{J}(\mathbf{U})$, comme le montrent les figures 5.8 et 5.9. Mais ce dernier reste, dans tous les cas, meilleur que le conditionnement de $\nabla^2 \mathcal{J}(\mathbf{X})$.

D'autres preconditionneurs peuvent être utilisés. Dans [Fis98] et repris dans [Tré05], la fonction coût est preconditionnée avec la matrice suivante

$$\mathbf{Id} + \sum_{i=1}^k (\mu_i - 1) \mathbf{w}_i \mathbf{w}_i^T,$$

où les k couples (μ_i, \mathbf{w}_i) correspondent aux k premières valeurs propres et vecteurs propres de la matrice hessienne.

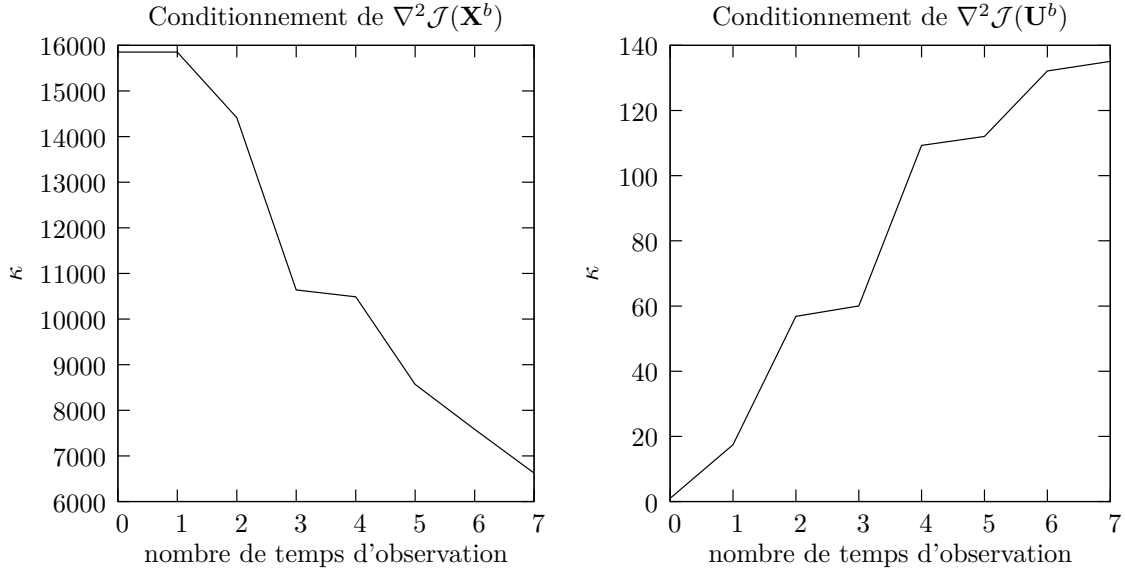


FIG. 5.8. Conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} aux points \mathbf{X}^b et \mathbf{U}^b en fonction du nombre de temps d'observation. La fenêtre d'assimilation est de 18 heures. Le transitoire et les matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} sont décrits au chapitre 7.

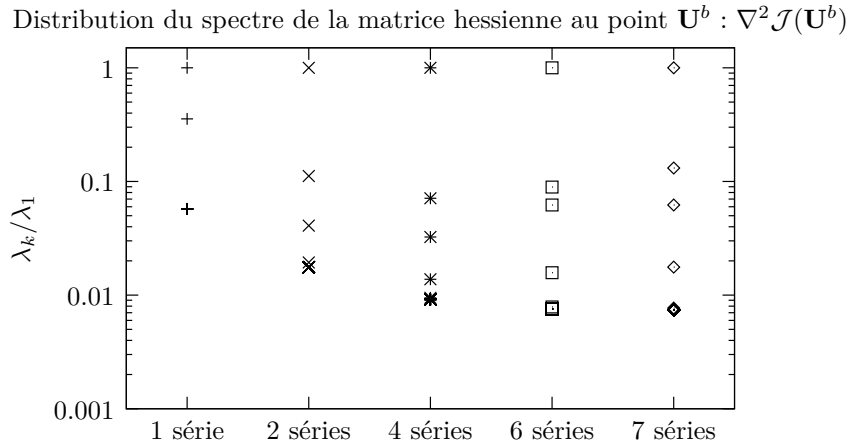


FIG. 5.9. Distribution du spectre de la matrice $\nabla^2 \mathcal{J}(\mathbf{U}^b)$ en fonction du nombre de séries d'observation. Pour chaque série, on a fait figurer les 60 valeurs propres de la matrice. Les plus petites valeurs propres sont confondues dans cette figure. La fenêtre d'assimilation est de 18 heures. Le transitoire est décrit au chapitre 7.

5.2 Étude du comportement général de la minimisation

Avant de comparer différentes méthodes de minimisation, on propose de reprendre les premières expériences d'assimilation présentées à la fin du chapitre 4, afin d'étudier l'évolution de la fonction coût et de son gradient au cours de la minimisation. L'algorithme de minimisation utilisé ici est l'algorithme de quasi-Newton (LBFGS) présenté au paragraphe 5.3.3.

Pour toutes les études présentées dans ce mémoire, on a choisi un critère d'arrêt mesurant la réduction du gradient depuis le gradient initial :

$$\frac{\|\nabla \mathcal{J}(\mathbf{X}_k)\|_2}{\|\nabla \mathcal{J}(\mathbf{X}_0)\|_2}.$$

On a fixé ce critère de réduction à 10^{-4} .

On présente l'évolution du gradient au cours de la minimisation d'une fonction coût prenant en compte des observations exactes mais n'intégrant pas de terme d'ébauche (figure 5.10). On ne remarque pas de différence de vitesse de convergence entre le gradient de \mathcal{J} par rapport à la concentration xénon et le gradient de \mathcal{J} par rapport à la concentration d'iode. On note que les plus forts gradients se situent au milieu de chacune des moitiés inférieure et supérieure du cœur ainsi que dans les premières mailles de la moitié inférieure du cœur. Enfin, on remarque que c'est dans les premières mailles de la moitié inférieure du cœur que le gradient reste le plus élevé à la fin de la minimisation.

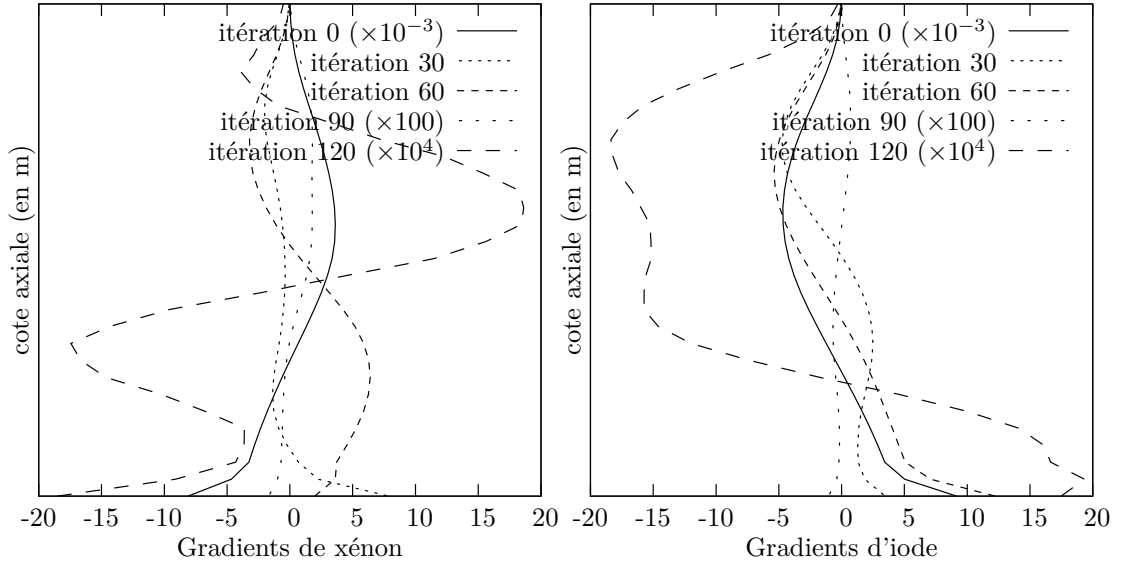


FIG. 5.10. Évolution du gradient de la fonction coût au cours de la minimisation. Il s'agit du schéma sans terme d'ébauche et avec observations exactes présenté page 110. Les vecteurs gradient ont été multipliés par des puissances de 10 (voir légende) pour améliorer la lisibilité.

5.3 Comparaison de méthodes de minimisation non linéaire

Une grande variété d'algorithmes sont disponibles pour la minimisation de la fonction coût. On ne présente et teste ici que les trois algorithmes de minimisation les plus populaires de

la communauté de l'assimilation variationnelle : le gradient non linéaire, le LBFGS (quasi-Newton) et le Gauss-Newton tronqué. Ce dernier est très utilisé par cette communauté en raison des performances dont il fait preuve pour les problèmes de météorologie notamment. Le classement, en terme de performance, de ces trois méthodes n'est pas exactement le même pour les applications de neutronique.

Présentation des cas tests : On souhaite étudier la performance de ces trois méthodes sur des cas plus ou moins “difficiles”, c'est-à-dire sur des cas plus ou moins bien conditionnés. On propose trois séries de tests. Les deux premiers correspondent à des problèmes proches (du point de vue du conditionnement et de la forme de la fonction coût) de ceux présentés dans la partie III. Ce n'est pas le cas du dernier qui vise à départager les différents algorithmes de minimisation sur des problèmes d'assimilation moins bien posés. Dans tous les tests, le vecteur d'observation est composé de 6 mesures de puissance intégrée (avec 30% d'erreur de mesure), 1 mesure d'axial offset de puissance (10% d'erreur de mesure) et 1 mesure de concentration en bore (1% d'erreur de mesure).

cas test 1 Il s'agit d'un cas très bien conditionné (conditionnement à l'optimum de la matrice hessienne préconditionnée est de 48). En effet, le terme d'ébauche est prépondérant dans la fonction coût : d'une part la confiance dans l'ébauche est bonne (incertitude d'environ 3% sur le terme d'ébauche) et d'autre part, les observations sont moyennement fiables et en faible nombre (2 séries d'observation, soit 2×8 mesures). Pour information, le transitoire modélisé est décrit dans le chapitre 7 et la taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures.

cas test 2 Il s'agit d'un cas un peu moins bien conditionné ($\kappa(\nabla^2 \mathcal{J}^*) = 365$). L'expérience d'assimilation se déroule sur 3 heures et prend en compte 4 séries d'observation (4×8 mesures). La confiance dans l'ébauche reste élevée (incertitude d'environ 5%). Le transitoire modélisé est décrit dans le chapitre 8.

cas test 3 Il s'agit d'une expérience construite dans le but de tester la robustesse des différents algorithmes de minimisation : le schéma d'assimilation repose essentiellement sur les données de type observation qui sont nombreuses (13 temps d'observation) et plus précises que l'ébauche. Ainsi le conditionnement est très mauvais ($\kappa(\nabla^2 \mathcal{J}^*) \approx 4 \times 10^6$). Le transitoire modélisé est décrit dans le chapitre 6.

On rappelle que les itérations de minimisation sont stoppées lorsque la relation suivante est vérifiée :

$$\frac{\|\nabla \mathcal{J}(\mathbf{X}_k)\|_2}{\|\nabla \mathcal{J}(\mathbf{X}_0)\|_2} < 10^{-4}.$$

5.3.1 Généralités

On s'intéresse à la minimisation d'une fonction $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ qu'on suppose suffisamment régulière (au moins deux fois différentiable). Lorsque f est quadratique convexe, elle admet un unique minimum \mathbf{X}^* . Quand f est non linéaire et non convexe, elle peut posséder plusieurs minima locaux. On rappelle qu'un minimum (ou maximum) \mathbf{X}^* de f vérifie les propriétés suivantes :

- le gradient de f en ce point est nul (condition nécessaire du premier ordre),
- la matrice hessienne de f en ce point est définie positive⁸ (condition nécessaire du second ordre).

⁸Une matrice \mathbf{H} est définie positive si $\forall \mathbf{X} \neq 0, \mathbf{X}^T \mathbf{H} \mathbf{X} \geq 0$.

On construit un algorithme itératif de la forme :

$$\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{X}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k, \quad (5.3)$$

où \mathbf{p}_k la direction de descente et α_k le pas de descente positif sont choisis de telle sorte qu'*a minima*, la condition $f(\mathbf{X}_{k+1}) < f(\mathbf{X}_k)$ soit vérifiée. En développant au premier ordre la fonction f autour du point \mathbf{X}_k , on a :

$$f(\mathbf{X}_k + \alpha \mathbf{p}_k) = f(\mathbf{X}_k) + \alpha \nabla f(\mathbf{X}_k)^T \cdot \mathbf{p}_k + O(\alpha^2).$$

Pour que \mathbf{p}_k soit une direction de descente, il faut donc que \mathbf{p}_k vérifie $\nabla f(\mathbf{X}_k)^T \cdot \mathbf{p}_k < 0$. Le choix de la direction \mathbf{p}_k et du pas de descente α_k permet de développer toute une gamme d'algorithmes de minimisation.

Lorsque f est convexe et sous condition que les pas de descente α_k soient bien calculés, cet algorithme converge vers \mathbf{X}^* quel que soit le point d'initialisation \mathbf{X}_0 , la rapidité de convergence dépendant de la distribution des valeurs propres de la matrice hessienne de f . Il existe en revanche peu de résultats de convergence lorsque f est non linéaire. De plus, la présence de minima locaux rend l'algorithme itératif sensible au choix du point de départ : l'algorithme peut en effet converger vers un minimum local proche du point de départ.

On distingue deux grandes familles d'algorithmes de minimisation :

- les méthodes de type gradient qui consistent à calculer les directions \mathbf{p}_k à partir de la connaissance du gradient ∇f ;
- les méthodes de type Newton qui requièrent, en plus du gradient, la connaissance exacte ou approchée de la matrice hessienne pour calculer les directions \mathbf{p}_k .

Ces méthodes utilisent souvent un algorithme de recherche linéaire pour déterminer le pas α_k .

Algorithme de recherche linéaire Une fois la direction de descente \mathbf{p}_k fixée, il s'agit de déterminer le pas de descente. L'algorithme de recherche linéaire consiste à chercher le minimum de la fonction 1D ψ_k définie par :

$$\psi_k(\alpha) : \alpha \rightarrow f(\mathbf{X}_k + \alpha \mathbf{p}_k).$$

En général, cette optimisation coûte cher et on préfère utiliser un algorithme approximatif de recherche linéaire : on ne recherche plus le minimum de ψ_k mais un pas qui vérifie certaines conditions d'acceptabilité.

La première condition d'acceptabilité est que le pas α_k réduise la fonction f , i.e. :

$$f(\mathbf{X}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) < f(\mathbf{X}_k).$$

Cette condition n'est toutefois pas suffisante pour assurer la convergence de l'algorithme vers le minimum. Deux critères fréquemment utilisés et regroupés sous l'appellation de conditions de Wolfe, fixent des conditions plus sévères.

Conditions de Wolfe

décroissance suffisante Le pas α doit réduire la fonction f en dessous d'un certain seuil fixé par le paramètre $c_1 \in (0, 1)$ (on rappelle que par construction $\nabla_{\mathbf{X}} f(\mathbf{X}_k)^T \cdot \mathbf{p}_k < 0$)

$$f(\mathbf{X}_k + \alpha \mathbf{p}_k) \leq f(\mathbf{X}_k) + c_1 \alpha \nabla f(\mathbf{X}_k)^T \cdot \mathbf{p}_k.$$

condition de courbure On souhaite, de plus, qu'il n'y ait pas dans un proche voisinage de α , un autre pas $\tilde{\alpha}$ qui soit bien meilleur ($f(\mathbf{X}_k + \tilde{\alpha}\mathbf{p}_k) \ll f(\mathbf{X}_k + \alpha\mathbf{p}_k) = \psi_k(\alpha)$). Cette contrainte se traduit par une dérivée $\psi'_k(\alpha)$ qui ne doit pas être trop négative

$$\nabla_{\mathbf{X}} f(\mathbf{X}_k + \alpha\mathbf{p}_k)^T \cdot \mathbf{p}_k > c_2 \nabla_{\mathbf{X}} f(\mathbf{X}_k)^T \cdot \mathbf{p}_k,$$

où $c_2 \in (c_1, 1)$ est un paramètre à fixer.

La seconde condition de Wolfe n'assure cependant pas qu'on puisse être proche du minimum de ψ_k : on peut choisir de cette sorte des pas α tels que la valeur de la dérivée de ψ_k en ces points soit positive et grande. Pour exclure ces pas, il est préférable d'imposer que la dérivée $\psi'_k(\alpha)$ soit petite en valeur absolue (on sélectionne les pas dans la "vallée" proche du minimum de ψ_k) :

$$|\nabla_{\mathbf{X}} f(\mathbf{X}_k + \alpha\mathbf{p}_k)^T \cdot \mathbf{p}_k| \leq c_2 |\nabla_{\mathbf{X}} f(\mathbf{X}_k)^T \cdot \mathbf{p}_k|.$$

On parle dans ce cas des conditions fortes de Wolfe.

La contrainte $0 < c_1 < c_2 < 1$ permet d'assurer qu'il existe un intervalle de pas vérifiant ces conditions. Un choix de paramètres (c_1, c_2) exigeant consiste à prendre c_1 élevé et c_2 petit. Sur le plan pratique, il est conseillé de prendre c_1 à une petite valeur ($c_1 = 1.10^{-4}$). Lorsque la direction de descente est déterminée par une méthode de gradient, il est préconisé de prendre $c_2 = 0.1$ et, quand il s'agit d'une direction de descente calculée par une méthode de type Newton, il vaut mieux prendre $c_2 = 0.9$ [Noc99].

L'algorithme de recherche d'un pas α^* vérifiant les conditions de Wolfe consiste à déterminer un intervalle borné le contenant et à construire une suite de pas convergeant vers ce pas optimal en réduisant cet intervalle, appelé *intervalle de confiance*. Il en existe plusieurs types. Citons celui de Moré et Thuente [Mor94] qui se base sur une interpolation cubique pour déterminer le nouvel itéré de la suite de pas. Signalons également qu'il existe d'autres critères d'acceptabilité menant à d'autres algorithmes de recherche linéaire (voir [Gil90]).

5.3.2 Méthode de gradient non linéaire

Présentation, implémentation et coût de la méthode

Gradient conjugué linéaire L'algorithme du gradient conjugué linéaire est une méthode itérative permettant de résoudre le problème :

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{b},$$

ou le problème équivalent :

$$\min_{\mathbf{X}} \phi(\mathbf{X}) \text{ avec } \phi(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} - \mathbf{b}^T \mathbf{X},$$

où \mathbf{A} est une matrice symétrique, définie positive de taille $n \times n$.

La direction de descente \mathbf{p}_k de l'itération k est choisie comme une combinaison linéaire de la précédente direction \mathbf{p}_{k-1} et du gradient de ϕ en \mathbf{X}_k (ce gradient correspond au résidu $\mathbf{r}_k = \mathbf{A}\mathbf{X}_k - \mathbf{b}$ à l'itéré k) :

$$\mathbf{p}_k = -\mathbf{r}_k + \beta_k \mathbf{p}_{k-1},$$

où le scalaire β_k est ajusté de sorte que les directions \mathbf{p}_k et \mathbf{p}_{k-1} soient conjuguées par rapport à \mathbf{A} , i.e. $\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_{k-1} = 0$. Le pas de descente positif α_k est fixé comme étant le minimum de la fonction $\alpha \rightarrow \phi(\mathbf{X}_k + \alpha \mathbf{p}_k)$. À l'itéré $k + 1$, ces paramètres sont calculés de la manière suivante

$$\begin{cases} \alpha_k = -\frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{p}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k}, \\ \beta_{k+1} = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_{k-1}}{\mathbf{p}_{k-1}^T \mathbf{A} \mathbf{p}_{k-1}}. \end{cases}$$

Cette construction des directions de descente permet d'explorer tout l'espace de minimisation : les directions sont en effet construites de manière à former une base de l'espace de minimisation. C'est pour cette raison, qu'en théorie, l'algorithme du gradient conjugué converge en au plus $N + 1$ itérations et peut donc être considéré comme une méthode directe. Compte tenu des erreurs d'arrondis, les relations de A-conjugaison entre les directions de descente ne sont pas vérifiées exactement et l'algorithme du gradient conjugué doit être considéré comme une méthode itérative. Des techniques de préconditionnement permettent d'améliorer la convergence.

Le gradient conjugué requiert peu de mémoire (il n'y a besoin de stocker que la direction précédente) et peu de calculs (essentiellement des produits scalaires) : il est donc *adapté aux systèmes de grande taille*.

Gradient non linéaire : La méthode de gradient non linéaire généralise la méthode du gradient conjugué pour des problèmes non linéaires. La première extension est apportée par Fletcher et Reeves [Fle64] qui proposent de :

- remplacer le résidu \mathbf{r}_k par l'expression du gradient de f dans le calcul de β_{k+1} (on rappelle que dans le cas linéaire, le résidu et le gradient de ϕ se confondent) :

$$\beta_{k+1}^{FR} = \frac{\nabla f_{k+1}^T \nabla f_{k+1}}{\nabla f_k^T \nabla f_k};$$

- rechercher le pas de descente α_k optimal le long de la direction \mathbf{p}_k par un algorithme de recherche linéaire (*line search* en anglais) .

Polak et Ribière [Pol69] proposèrent la variante suivante pour le calcul du β_{k+1} :

$$\beta_{k+1}^{PR} = \frac{\nabla f_{k+1}^T (\nabla f_{k+1} - \nabla f_k)}{\nabla f_k^T \nabla f_k},$$

réputée plus robuste et plus efficace que la précédente. **Ces deux formules de calcul du β_{k+1} sont équivalentes pour une fonction quadratique.**

Une fois la direction de descente \mathbf{p}_k fixée, le pas de descente α_k de la formule (5.3) est calculé par la méthode de recherche linéaire de Moré [Mor94]. Cette méthode cherche un pas de descente vérifiant les conditions de Wolfe.

Implémentation : Pour notre application xénon, on a minimisé la fonction coût préconditionnée par le facteur de Cholesky et rappelée ci-dessous :

$$\mathcal{J}(\mathbf{U}) = \frac{1}{2}(\mathbf{U} - \mathbf{U}^b)^T (\mathbf{U} - \mathbf{U}^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U}) \right)^T \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{B}^{1/2} \mathbf{U}) \right).$$

Coût de la méthode : Chaque itération k de l'algorithme du gradient non linéaire nécessite le calcul du pas de descente α_k qui correspond à un certain nombre d'itérations de la méthode de recherche linéaire dont chacune nécessite à son tour :

- une évaluation de la fonction coût au point \mathbf{U} , soit n_{obs} évaluations du modèle direct ;
- une évaluation du gradient $\nabla_{\mathbf{U}}\mathcal{J}$, soit n_{obs} évaluations du modèle direct (mais qui sont déjà effectuées pour l'évaluation de \mathcal{J}) et n_{obs} évaluations du modèle adjoint au point $\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}$ et appliqué au point $\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}))$ avec $0 \leq i < n_{obs} - 1$.

Soit $n_{\alpha k}$ le nombre d'itérations de la recherche linéaire pour l'itéré k , une itération du gradient coûte donc $n_{obs} \times n_{\alpha k}$ évaluations du modèle direct et $n_{obs} \times n_{\alpha k}$ évaluations du modèle adjoint. En pratique $n_{\alpha k}$ vaut entre 2 et 4 dans les applications traitées. On ne tient pas compte de l'évaluation des produits matrice/vecteur : ces derniers sont négligeables en temps calcul par rapport au coût d'évaluation des modèles⁹.

Résultats

Premiers résultats sur la vitesse de convergence du gradient non linéaire : La figure 5.11 présente, pour les cas tests 1 et 2, la diminution de la fonction coût et de la norme du gradient au cours des itérations indicées k . Pour ces deux minimisations, les constantes sont fixées à $c_1 = 10^{-4}$ et $c_2 = 0.1$ (valeurs par défaut conseillées dans [Noc99]). Le premier cas test converge en 7 itérations alors que le second s'arrête au bout de 57 itérations. La diminution du rapport $\mathcal{J}(\mathbf{X}_k)$ est comparable sur les 5 premières itérations. Mais la convergence vers le minimum est ensuite extrêmement lente pour le second cas test. Dans le cas du troisième cas test, très mal conditionné et dont on présente les résultats plus loin (figure 5.12), on n'est pas parvenu en une cinquantaine d'itérations à diminuer significativement la valeur de la fonction coût. On observe ici une dégradation de la vitesse de convergence avec l'augmentation du conditionnement de la matrice hessienne à l'optimum.

Sensibilité au point d'initialisation : Pour les deux premiers cas tests, le choix du point de départ n'agit que sur le nombre d'itérations nécessaire à la convergence de l'algorithme : plus le point de départ est éloigné de la solution, plus ce nombre d'itérations est élevé. Pour le troisième cas test, en revanche, la minimisation initialisée avec l'ébauche se finit mal. En effet, dès la première itération, l'algorithme calcule un itéré $\mathbf{X}_k + \alpha \mathbf{p}_k$ qui sort du domaine de validité du modèle implémenté dans CIREP1D. L'échec de la minimisation provient donc du modèle. Il faudrait mettre en place une stratégie permettant, dans un tel cas, de revenir dans le domaine. Dans la suite, la minimisation de ce cas test est initialisée avec la solution d'un problème proche (on a un peu augmenté le poids de l'ébauche dans la fonction coût).

On propose à présent d'étudier l'influence sur la vitesse de convergence, des paramètres de l'algorithme du gradient :

- formule de calcul de la direction de descente \mathbf{p}_k (Fletcher-Reeves, Polak-Ribière),
- valeur des constantes c_1 et c_2 du critère de Wolfe.

Mode de calcul de la direction \mathbf{p}_k : Pour les deux premiers cas tests qui ne sont pas fortement non linéaires, on n'a pas identifié de différence d'efficacité entre les méthodes de calcul de \mathbf{p}_k de Fletcher-Reeves et de Polak-Ribière. Pour le troisième cas test (voir la figure 5.12, où

⁹Cela peut ne pas être le cas pour une application industrielle 3D où les matrices seraient de tailles très importantes ; on rappelle que les matrices manipulées ici sont de taille au plus 60.

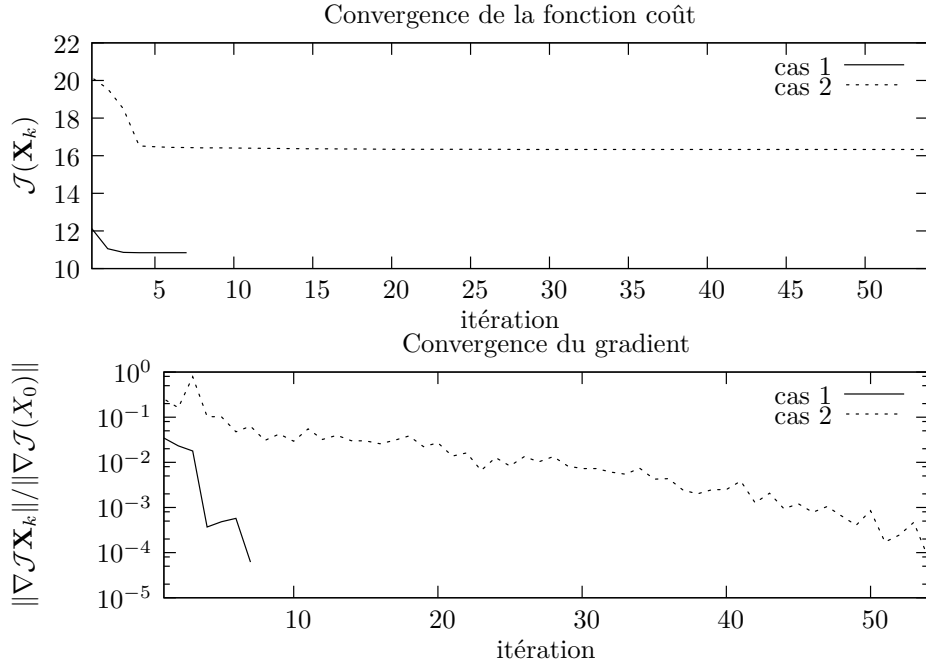


FIG. 5.11. Diminution de la fonction coût et du gradient au cours des itérations de minimisation avec l'algorithme du gradient non linéaire. Le premier cas test converge en 7 itérations et le second cas test, en 57 itérations. La méthode de descente est celle de Polak-Ribière et les constantes du critère de Wolfe sont fixées à $c_1 = 10^{-4}$ et $c_2 = 0.1$.

pour plus de lisibilité, seules les 30 premières itérations sont montrées), on observe une légère différence en faveur de la méthode de Fletcher-Reeves. Elle est pourtant présentée comme étant généralement moins efficace que la méthode de Polak-Ribière [Ghi82].

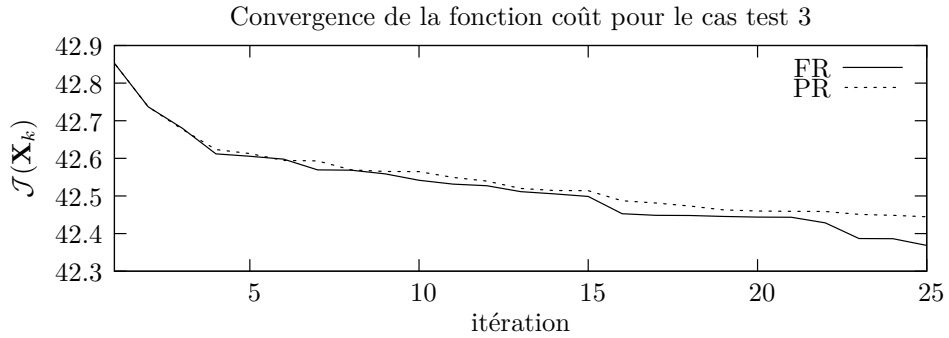


FIG. 5.12. Influence du calcul de la direction de descente lors de la minimisation du troisième cas test. (FR), (PR) désignent respectivement les méthodes de Fletcher-Reeves, Polak-Ribière.

Choix des constantes c_1 et c_2 : Les constantes de la condition de Wolfe permettent d'agir sur la vitesse de convergence de l'algorithme. Pour le premier cas test, ces constantes n'ont pas d'influence. Pour le second cas test, on note une légère différence dans le calcul des itérés mais cela n'affecte pas le nombre d'itérations nécessaire à la convergence. C'est seulement pour le troisième cas test qu'on note une influence notable de ces constantes. On compare, dans le

tableau 5.1, le nombre d'itérations nécessaire à la réduction de 1% de la fonction coût. On y donne également le nombre d'évaluations de la fonction coût et de son gradient. On constate qu'en rendant plus contraignant le critère de Wolfe, on améliore la vitesse de réduction de la fonction coût mais, en même temps, on augmente le nombre d'itérations nécessaire à la recherche linéaire. Il y a donc un optimum à trouver pour le paramètre c_2 . Dans notre cas, la valeur $c_2 = 0.1$ (valeur conseillée dans [Noc99]) semble être un bon compromis.

	nb d'itérations de l'algorithme	nb d'évaluations de \mathcal{J} et $\nabla \mathcal{J}$
$c_2 = 10^{-3}$	11	23
$c_2 = 0.1$	4	11
$c_2 = 0.9$	4	14

TAB. 5.1. Effets de la variation de la constante c_2 du critère de Wolfe sur la minimisation du troisième cas test. La constante c_1 est fixée à 10^{-4} . Les indications de nombre d'itérations et d'évaluations sont données pour une réduction de 1% de la fonction coût.

Réinitialisation de l'algorithme : On a testé l'effet de la réinitialisation, toutes les 10 itérations, de l'algorithme du gradient sur le second cas test (on rappelle que ce cas test converge en 57 itérations). On constate une légère amélioration avec cette réinitialisation.

5.3.3 Méthode de quasi-Newton (LBFGS)

Présentation, implémentation et coût de la méthode

Les méthodes de type Newton s'appuient sur un développement à l'ordre 2 de f pour déterminer le pas de descente \mathbf{p}_k :

$$f(\mathbf{X}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) = f(\mathbf{X}_k) + \alpha_k \nabla f(\mathbf{X}_k)^T \mathbf{p}_k + \frac{1}{2} \alpha_k^2 \mathbf{p}_k^T \nabla^2 f(\mathbf{X}_k) \mathbf{p}_k + o(\alpha^3),$$

où $\nabla^2 f(\mathbf{X}_k)$ désigne la matrice hessienne de f en \mathbf{X}_k . La direction de descente \mathbf{p}_k et le scalaire positif α_k sont choisis de sorte que la quantité

$$\alpha_k \nabla f(\mathbf{X}_k)^T \mathbf{p}_k + \frac{1}{2} \alpha_k^2 \mathbf{p}_k^T \nabla^2 f(\mathbf{X}_k) \mathbf{p}_k$$

soit la plus petite possible. Si on fixe α_k et qu'on suppose que la matrice hessienne est inversible, alors le minimum de cette quantité est donné par :

$$\mathbf{p}_k = -\alpha_k (\nabla^2 f(\mathbf{X}_k))^{-1} \nabla f(\mathbf{X}_k).$$

Le choix $\alpha_k = 1$ correspond à la méthode de Newton. On peut également calculer α_k de sorte qu'il remplit les conditions de Wolfe présentées précédemment.

Cette méthode est coûteuse puisqu'elle requiert le calcul de la matrice hessienne et la résolution d'un système linéaire. Elle est donc inapplicable en pratique pour des problèmes non linéaires de grande taille. D'autre part si la matrice hessienne est proche de la singularité, ce processus peut diverger.

Une alternative proposée par les méthodes de type quasi-Newton consiste à construire récursivement les matrices hessiennes au cours des itérations, à l'aide des gradients de f . On note \mathbf{B}_k l'approximation de $\nabla^2 f(\mathbf{X}_k)$ obtenue à l'itération k . La formule de récurrence s'appuie sur la condition de quasi-Newton. Puisque la matrice hessienne vérifie le développement à l'ordre 1 de $\nabla f(\mathbf{X}_k)$:

$$\alpha_k \nabla^2 f(\mathbf{X}_k) \mathbf{p}_k = \nabla f(\mathbf{X}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) - \nabla f(\mathbf{X}_k) + O(\alpha_k^2),$$

on impose que la matrice \mathbf{B}_{k+1} vérifie la condition suivante appelée condition de quasi-Newton :

$$\alpha_k \mathbf{B}_{k+1} \mathbf{p}_k = \mathbf{B}_k (\nabla f(\mathbf{X}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) - \nabla f(\mathbf{X}_k)). \quad (5.4)$$

La méthode de quasi-Newton considérée en pratique comme la plus efficace a été proposée en 1970 par Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno et est connue sous le nom de méthode BFGS [Bro70][Fle70]. Dans cette méthode, l'itéré \mathbf{B}_{k+1} est calculé de la façon suivante :

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k - \frac{1}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k} \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T \mathbf{B}_k + \frac{1}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k} \mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T, \quad (5.5)$$

où $\mathbf{s}_k = \alpha_k \mathbf{p}_k$ et $\mathbf{y}_k = \nabla f(\mathbf{X}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) - \nabla f(\mathbf{X}_k)$.

Implémentation : L'algorithme utilisé est celui développé par D. Liu et J. Nocedal (LBFGS, [Liu89]). Il consiste à faire l'économie du stockage des matrices \mathbf{B}_k en évaluant directement le produit matrice/vecteur $\mathbf{B}_k \nabla \mathcal{J}(\mathbf{U}_k)$ en "développant" la formule récursive (5.5) définissant \mathbf{B}_k . Pour cela, il faut stocker les vecteurs $(\mathbf{y}_i)_i$ et $(\mathbf{s}_i)_i$. Une économie de mémoire est réalisée en ne stockant que les $m + 1$ précédents vecteurs \mathbf{s}_i et \mathbf{y}_i à l'itération k . Ainsi les m premières itérations de l'algorithme BFGS et LBFGS sont identiques. Le pas de descente α_k est déterminé grâce à la méthode de recherche linéaire de Moré [Mor94].

Coût de la méthode : En ce qui concerne le nombre d'évaluations de la fonction coût et de son gradient, cette méthode est comparable à la précédente : une itération nécessite $n_{obs} \times n_{\alpha k}$ évaluations du modèle direct et $n_{obs} \times n_{\alpha k}$ évaluations du modèle adjoint où $n_{\alpha k}$ correspond au nombre d'itérations de la recherche linéaire. Mais en pratique, l'entier $n_{\alpha k}$ s'est révélé être presque toujours égal à l'unité pour la méthode de quasi-Newton tandis que pour la méthode de gradient, il était en moyenne de 3.

Résultats

Premiers résultats sur la vitesse de convergence de l'algorithme LBFGS : La figure 5.13 présente, pour les cas tests 1 et 2, la diminution de la fonction coût et de la norme du gradient au cours des itérations k . Pour ces calculs, la constante c_2 de la recherche linéaire est fixée à $c_2 = 0.9$ (valeur par défaut conseillée dans [Noc99]) et le nombre m de corrections est égal à 15 (valeur maximale recommandée). Le premier cas test converge en 7 itérations alors que le second s'arrête au bout de 19 itérations (on rappelle que ces nombres étaient respectivement de 7 et 57 pour le gradient non linéaire). Comme avec l'algorithme du gradient, le troisième cas test n'était pas parvenu à convergence au-delà de 50 itérations (figure 5.14). On observe ici également un ralentissement de la vitesse de convergence de l'algorithme avec la dégradation du conditionnement. Cet effet est cependant plus atténué que dans le cas du gradient non linéaire.

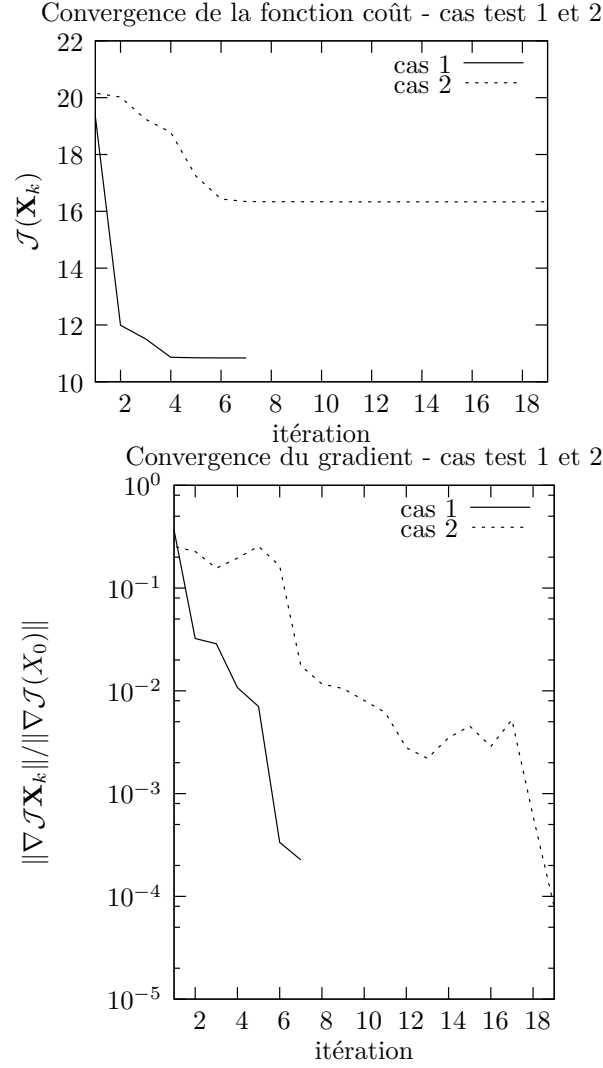


FIG. 5.13. Diminution de la fonction coût et de son gradient au cours des itérations de minimisation avec l'algorithme LBFGS ($m = 15$ et $c_2 = 0.9$). Le premier cas test converge en 7 itérations et le second cas test en 19 itérations.

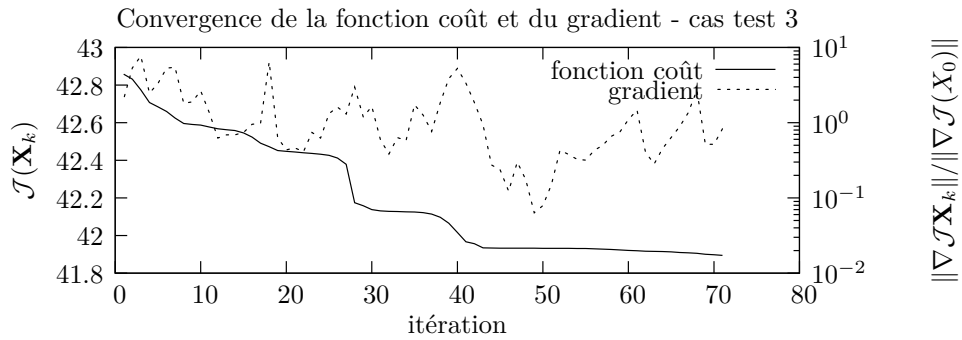


FIG. 5.14. Cas test 3 : diminution de la fonction coût et de la norme du gradient au cours des itérations de minimisation avec l'algorithme LBFGS ($m = 15$ et $c_2 = 0.9$) .

Sensibilité au point d'initialisation : Comme pour l'algorithme de gradient non linéaire, le choix du point d'initialisation n'est important que pour le troisième cas test.

On propose de faire varier les réglages suivants de la méthode de quasi-Newton :

- entier m de vecteurs stockés pour le calcul de la matrice \mathbf{B}_k ,
- précision de la recherche linéaire : choix de la constante c_2 (la constante c_1 est fixée à 10^{-4}). On rappelle que plus c_2 a une valeur basse, plus le critère de Wolfe à vérifier est sévère. Pour notre application, la méthode LBFGS n'est pas sensible au paramètre c_1 .

Influence de l'entier m de vecteurs stockés : Pour les cas tests 1 et 2, on n'a pas noté une accélération significative de la convergence en augmentant m (écart de 3 itérations par exemple entre un calcul avec $m = 5$ et $m = 25$ pour le second cas test). On compare dans la figure 5.15, la convergence de la fonction coût du troisième cas test pour $m = 5$ et $m = 15$. On remarque que la convergence de la fonction pour $m = 5$ est en fait très proche de celle du gradient non linéaire (figure 5.14). En diminuant le nombre de vecteurs stockés pour la mise à jour de la matrice, on dégrade fortement la vitesse de convergence. Pour ce cas test, la qualité de l'approximation de la matrice hessienne est importante.

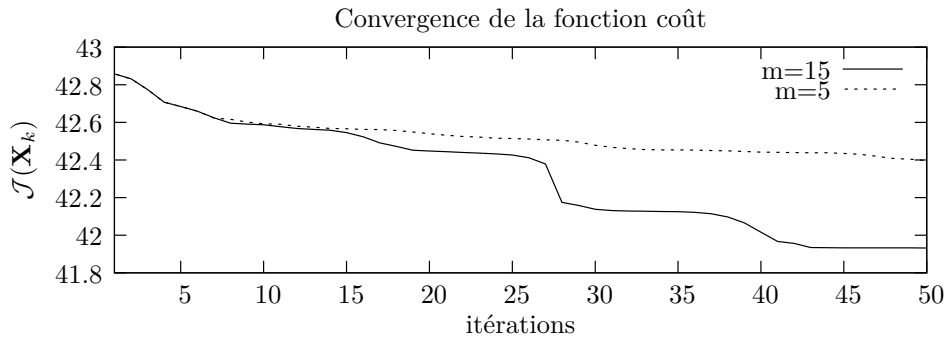


FIG. 5.15. Influence de l'entier m sur la convergence de la fonction coût avec l'algorithme LBFGS pour le cas test 3.

Choix de la constante c_2 : On rappelle que la constante c_2 de Wolfe permet d'imposer une contrainte sur la valeur de la dérivée $\nabla_{\alpha} \mathcal{J}(\mathbf{X}_k + \alpha \mathbf{p}_k)$. Lorsque la fonction à minimiser est quadratique, l'algorithme de recherche linéaire ne requiert qu'une seule itération pour trouver le pas de descente. Pour le cas test 1, qui n'est pas fortement non linéaire, il n'y a donc pas de gain à attendre. Pour le second cas test (figures 5.16 et 5.17), on observe un gain de vitesse de convergence sur les premières itérations mais ce gain s'efface ensuite. En résumé, on n'est pas parvenu à améliorer, pour les cas tests 1 et 2, la vitesse de convergence de la méthode de quasi-Newton en réglant les paramètres m et c_2 . C'est pour le cas test 3 qu'on peut mesurer l'influence de la constante c_2 .

5.3.4 Méthodes de type Gauss-Newton

Présentation, implémentation et coût de la méthode

Dans le domaine de l'assimilation variationnelle pour la météorologie, la méthode communément utilisée pour la minimisation de la fonction coût est une méthode de Gauss-Newton

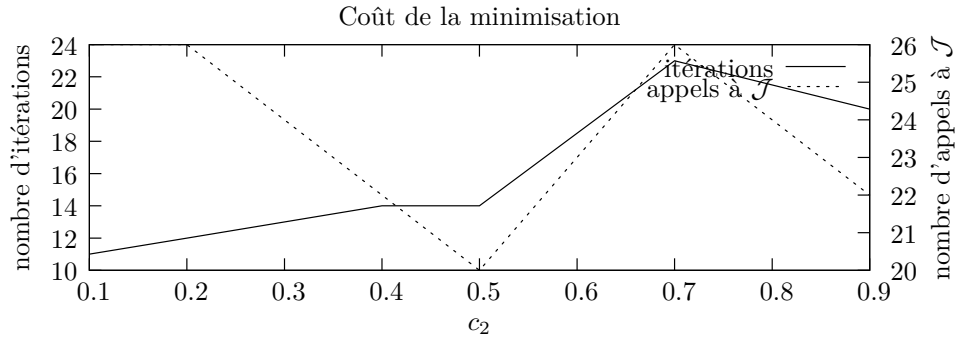


FIG. 5.16. Nombre d'itérations et d'appels à \mathcal{J} requis en fonction de la constante c_2 pour la convergence de l'algorithme LBFGS (cas test 2).

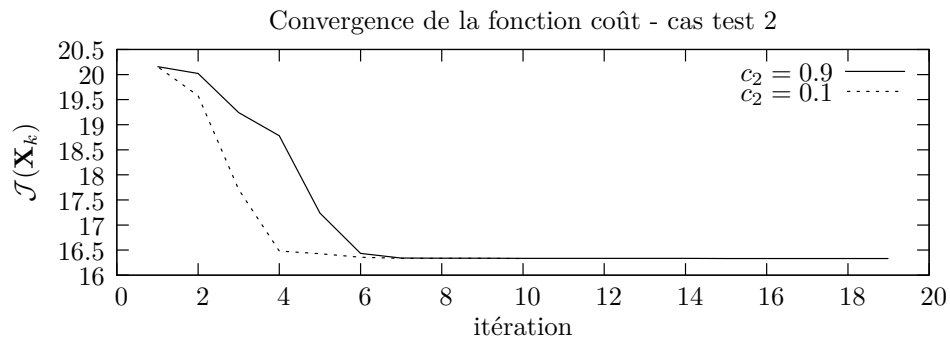


FIG. 5.17. Influence du paramètre c_2 sur la convergence de la fonction coût avec l'algorithme LBFGS (cas test 2).

tronqué, connue dans la communauté des assimilateurs sous le nom de méthode incrémentale [Cou94]. Cette méthode est basée sur la mise en place d'un schéma de minimisation à deux niveaux dont le niveau inférieur peut être résolu avec des modèles dégradés. Cette méthode donne des résultats satisfaisants en météorologie, même si les approximations réalisées dans la boucle interne peuvent poser des problèmes de convergence globale [Tré05]. On souhaite étudier la performance d'une telle méthode pour les problèmes d'assimilation appliqués au contrôle de la dynamique xénon.

On présente en quelques mots la méthode de Gauss-Newton. Pour plus de détails, on peut consulter [Ghi82]. Elle consiste à remplacer dans la méthode de Newton la matrice hessienne $\nabla^2 \mathcal{J}$ par l'approximation \mathbf{K} présentée dans l'équation (5.2) où le terme de second ordre est négligé :

$$\mathbf{K} = \mathbf{Id} + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}} \mathbf{B}^{1/2})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}} \mathbf{B}^{1/2}).$$

Cette matrice est semi-définie positive par construction.

On identifie alors deux étapes dans l'itération de la méthode de Gauss-Newton :

1. calcul de la direction de descente \mathbf{p}_k en résolvant le système **linéaire**

$$\mathbf{K}_k \mathbf{p}_k = \nabla \mathcal{J}(\mathbf{U}_k);$$

2. calcul du nouvel itéré

$$\mathbf{U}_{k+1} = \mathbf{U}_k + \mathbf{p}_k,$$

et évaluation de la fonction coût et du gradient en ce point \mathbf{U}_{k+1} .

La méthode de Gauss-Newton peut donc être vue comme la construction d'une suite d'itérés (\mathbf{U}_k) solutions de problèmes de minimisations linéaires. En pratique, pour éviter d'avoir à assembler la matrice \mathbf{K}_k , l'étape 1 est résolue par une méthode itérative qui ne nécessite que l'évaluation de \mathbf{K}_k appliqué au vecteur \mathbf{p}_k .

Pour abaisser le coût de cette méthode, il est possible de ne résoudre qu'approximativement l'étape 1 : c'est la méthode de Gauss-Newton tronqué. Cela peut se faire de différentes façons :

- résolution itérative du système linéaire de l'étape 1 non convergée (on prend un critère de convergence très lâche ou on bloque le nombre d'itérations maximal à une valeur faible) ;
- calcul de $\mathbf{K}_k \mathbf{p}_k$ à l'aide de modèles approchés (avec maillages plus grossiers ou même approximation 2D ou 1D pour des problèmes 3D).

L'algorithme de Gauss-Newton peut avoir une vitesse de convergence lente, voire peut ne pas converger du tout si le point de départ est trop éloigné du minimum. Une variante de la méthode de Gauss-Newton plus robuste sur ce dernier point et appelée méthode de Levenberg-Marquardt consiste à introduire un paramètre λ_k dans le calcul de la direction de descente [Ghi82] :

$$(\mathbf{K}_k + \lambda_k \mathbf{Id}) \mathbf{p}_k = -\nabla \mathcal{J}(\mathbf{U}_k).$$

L'idée est de pouvoir tirer parti à la fois des avantages de la méthode de Gauss-Newton et de la méthode du gradient. Elle peut cependant être parfois un peu plus lente que la méthode de Gauss-Newton pour des configurations favorables à cette dernière (point de départ proche du minimum par exemple). La suite des paramètres (λ_k) est construite de manière récursive :

- si on se rapproche de la solution, c'est-à-dire si $\mathcal{J}(\mathbf{X}_k) < \mathcal{J}(\mathbf{X}_{k-1})$, cela signifie que l'approximation quadratique de \mathcal{J} utilisée pour la mise à jour de la direction de descente est correcte. Dans ce cas on diminue la valeur du paramètre λ_k pour tendre un peu plus vers la méthode de Gauss-Newton :

$$\lambda_k = \lambda_{k-1}/\alpha;$$

- si au contraire, on s'en éloigne ($\mathcal{J}(\mathbf{X}_k) > \mathcal{J}(\mathbf{X}_{k-1})$), cela signifie que cette approximation quadratique n'est pas correcte. On augmente alors le paramètre λ_k pour se rapprocher d'une méthode de gradient

$$\lambda_k = \lambda_{k-1} \times \alpha.$$

Les valeurs courantes des paramètres α et de λ_0 sont les suivantes :

$$\alpha = 10 \quad \text{et} \quad \lambda_0 = 1 \times 10^{-3}.$$

L'inconvénient de cette variante est que lorsque λ est grand, on ne tient plus du tout compte de l'information de courbure donnée par la matrice hessienne. Une autre variante de cet algorithme consiste donc à prendre en compte la diagonale de la matrice \mathbf{K}_k

$$(\mathbf{K}_k + \lambda_k \text{diag}(\mathbf{K}_k))\mathbf{p}_k = -\nabla \mathcal{J}(\mathbf{X}_k).$$

Cet algorithme de Levenberg-Marquardt est un précurseur des méthodes de type région de confiance [Con92].

Implémentation : On a implémenté une méthode de Gauss-Newton ainsi que chacune des variantes présentées ci-dessus. La méthode itérative utilisée pour résoudre l'étape 1 (calcul de la direction de descente \mathbf{p}_k) est un gradient conjugué. Chaque itération interne nécessite :

- l'évaluation de $\mathbf{v} = \mathbf{H}_{|\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}} (\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{p}_k)$ soit n_{obs} appels au linéaire tangent ;
- l'évaluation de $(\mathbf{H}_{|\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{B}^{1/2}\mathbf{U}})^T \mathbf{v}$ soit n_{obs} appels au modèle adjoint.

Comme précédemment, on néglige dans ce calcul les produits matrice/vecteur. On rappelle que dans notre application le coût d'une évaluation de \mathcal{H} est du même ordre de grandeur que le coût de l'évaluation du modèle de dynamique $\mathcal{M}_{i,0}$ sur un pas de temps. Pour que cet algorithme soit performant, il faut donc que le surcoût de calcul occasionné par un plus grand nombre d'évaluations du linéaire tangent et de l'adjoint soit compensé, soit par un plus faible nombre d'itérations externes, soit par un coût d'évaluation du linéaire tangent et de l'adjoint dans la boucle interne bien inférieur à celui dans la boucle externe.

Coût de la méthode : Le coût de cette famille d'algorithmes est fonction de la méthode utilisée pour résoudre l'étape 1.

- Si la matrice \mathbf{K} est assemblée, l'étape 1 nécessite $n \times n_{obs}$ évaluations du linéaire tangent ou $p \times n_{obs}$ évaluations de l'adjoint.
- Dans le cas contraire, l'étape 1 doit être résolue de manière itérative. En notant N_1 le nombre d'itérations effectuées à l'étape 1, il faut $N_1 \times n_{obs}$ évaluations du linéaire et $N_1 \times n_{obs}$ évaluations de l'adjoint pour résoudre l'étape 1.

Ce nombre d'évaluations des modèles tangent et adjoint est ensuite à multiplier par le nombre d'itérations nécessaire à la convergence de la méthode de Gauss-Newton. En pratique, la seconde approche est bien moins chère même si elle nécessite quelques itérations de Gauss-Newton de plus que la première approche où le système linéaire est résolu de manière exacte.

Résultats

Minimisation avec assemblage de la matrice hessienne : Dans un premier temps, on se place dans une situation idéale où on calcule de manière explicite la matrice hessienne. En connaissant l'expression de la matrice hessienne, la boucle interne est alors résolue de manière exacte. On donne, dans la figure 5.18, la convergence de la fonction coût et du gradient pour les deux premiers cas tests étudiés qui convergent tous les deux en 4 itérations. Il n'y a donc pas d'augmentation du nombre d'itérations pour le second cas test, lié à la dégradation du conditionnement. Pour ces deux cas tests pour lesquels la convergence est immédiate, la variante de Levenberg-Marquardt n'apporte pas de gain. **En raison du faible nombre d'itérations nécessaire à la convergence de l'algorithme de Gauss-Newton, on dit ainsi que les fonctions coût des cas tests 1 et 2 sont quasi quadratiques.**

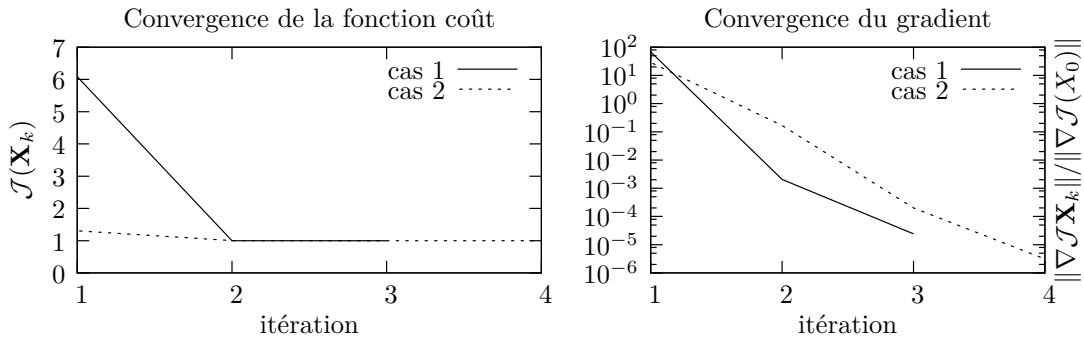


FIG. 5.18. Diminution de la fonction coût et de son gradient au cours des itérations de minimisation avec l'algorithme de Gauss-Newton exact. Les deux cas tests convergent en 4 itérations.

On n'est parvenu à résoudre le problème de minimisation du cas test 3 ni avec l'algorithme de Gauss-Newton exact, ni avec la variante de Levenberg-Marquardt. On présente, dans la figure 5.19, l'évolution de la fonction coût et de la norme de son gradient au cours de 18 itérations avec l'algorithme de Levenberg-Marquardt (initialisé avec $\lambda = 1$ et le facteur de réduction/accroissement $\alpha = 2$). On constate qu'après un début de convergence, l'algorithme se met à diverger et le dernier itéré calculé n'est plus physique (présence de termes négatifs). Il faudrait donc introduire des contraintes pour éviter de sortir du domaine de validité du modèle.

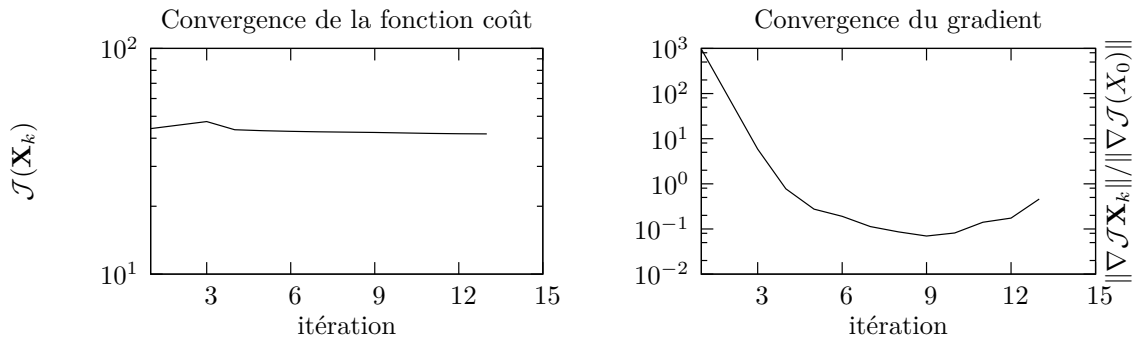


FIG. 5.19. Évolution de la fonction coût du cas test 3 et norme de son gradient au cours des itérations de l'algorithme de Levenberg-Marquardt exact. Le paramètre λ introduit dans la direction de descente est initialisé à 1. On a choisi un facteur de réduction/accroissement α égal à 2.

Minimisation avec un gradient conjugué tronqué pour la boucle interne : Pour diminuer le coût de la minimisation des deux premiers cas tests, on propose de résoudre le problème linéaire de la boucle interne avec un algorithme de gradient conjugué. Les calculs menés à convergence de la boucle interne (critère d'arrêt de 10^{-10}) sont identiques à ceux menés avec la résolution directe de celle-ci. Chaque boucle interne est résolue en moyenne en 9 itérations pour les deux cas tests.

Dans un second temps, on a diminué le critère d'arrêt de la boucle interne jusqu'au seuil de 10^{-1} . On n'a pas observé de divergence de l'algorithme de Gauss-Newton et on a obtenu une importante réduction du temps de calcul. Pour le deuxième cas test par exemple, la réduction du critère d'arrêt de 10^{-10} à 10^{-1} n'a entraîné qu'une seule itération supplémentaire de l'algorithme (5 itérations au lieu de 4) et on a obtenu un gain de temps de 30% par rapport à un calcul mené à convergence (c'est-à-dire avec un critère d'arrêt fixé à 10^{-10}).

Ces bonnes performances doivent être modérées compte tenu du coût de l'évaluation du linéaire tangent et de l'adjoint dans la boucle interne. En météorologie, la boucle interne est résolue avec des modèles dégradés. Dans nos tests, ce n'est pas le cas. Comme le nombre d'évaluations du modèle tangent et adjoint nécessaire à la convergence de l'algorithme de Gauss-Newton, est finalement supérieur à celui de l'algorithme de quasi-Newton (LBFGS), ce dernier reste plus performant en terme de coût calcul.

5.3.5 Synthèse des résultats

L'analyse d'un système d'assimilation variationnel est la solution d'un problème de minimisation, qui est généralement résolu par un algorithme itératif. Le **nombre d'itérations** nécessaire à la convergence de l'algorithme **détermine le coût de calcul de l'analyse** et donc la faisabilité de la méthode d'assimilation.

La vitesse de convergence des algorithmes est reliée aux caractéristiques numériques du système d'assimilation. On a montré, dans ce chapitre, que **le paramètre le plus important** du point de vue numérique est le **poids de l'ébauche** dans le système. En effet, plus le terme d'ébauche est prédominant, plus la fonction coût est proche de la quadraticité (au sens de Gauss-Newton) et meilleur est le conditionnement de sa matrice hessienne préconditionnée. Ces deux éléments sont des facteurs clés de succès pour la plupart des algorithmes de minimisation.

On a comparé trois algorithmes de minimisation sur trois cas tests. Les algorithmes de minimisation testés sont ceux utilisés dans la communauté de l'assimilation variationnelle : **l'algorithme de gradient non linéaire, un algorithme de type quasi-Newton (LBFGS) et un algorithme de Gauss-Newton**. Les deux premiers cas tests sont proches numériquement des systèmes d'assimilation mis en place dans la partie III : le conditionnement de la matrice hessienne préconditionnée est raisonnable (conditionnement de 48 et 365 respectivement). Le troisième cas vise à tester la robustesse des algorithmes. Il correspond à un système d'assimilation où le poids du terme d'ébauche est faible. La fonction coût correspondante est donc non linéaire et la matrice hessienne est très mal conditionnée.

On a illustré sur les deux premiers cas tests, que **l'augmentation du conditionnement dégradait la vitesse de convergence de l'algorithme de quasi-Newton** et de manière plus sensible encore, celle de **l'algorithme du gradient non linéaire**. En revanche, la convergence de l'algorithme de Gauss-Newton n'a pas été pénalisée par cette augmentation.

L'ensemble des algorithmes testés ont rencontré des difficultés pour minimiser la fonction coût du troisième cas test. L'initialisation par le vecteur d'ébauche s'est montrée inefficace. En

effet, l'ébauche est trop éloignée de la solution et le premier itéré calculé par les trois algorithmes sort du domaine de validité du modèle implémenté dans CIREP1D. La minimisation a finalement été initialisée par la solution d'un problème proche (on a un peu augmenté le poids de l'ébauche dans la fonction coût). Les algorithmes de **gradient non-linéaire** et de **quasi-Newton** se sont montrés **plus robustes** que l'algorithme de Gauss-Newton (et sa variante Levenberg-Marquardt). Bien que leur convergence ait été très lente, ils n'ont pas montré de signe de divergence. L'algorithme de Gauss-Newton, en revanche, a divergé.

En ce qui concerne le coût calcul, le coût d'une itération de l'algorithme de quasi-Newton est du même ordre de grandeur que celle de l'algorithme de gradient non-linéaire. Puisque cette dernière requiert plus d'itérations pour converger, on en déduit que l'algorithme de quasi-Newton est la moins chère des deux. Le coût d'une itération de Gauss-Newton est variable. Lorsque la matrice hessienne est assemblée, ce coût est très important puisqu'il comprend l'évaluation de n fois le linéaire tangent (dans notre cas, le coût de n évaluations du linéaire tangent est inférieur à celui de p évaluations de l'adjoint). Dans le cas contraire, si m indique le nombre d'itérations de la boucle interne de l'algorithme, le coût d'une itération (externe) comprend m fois l'évaluation du linéaire tangent et de l'adjoint. Normalement, ces modèles sont dégradés dans la boucle interne et leur évaluation dans cette dernière coûte moins cher que dans la boucle externe. Dans notre implémentation, ce n'est pas le cas et le surcoût engendré par ces évaluations n'est pas compensé par la diminution du nombre d'itérations pour la boucle externe.

En conclusion, l'**algorithme de LBFGS** a montré des qualités tant du point de vue de la robustesse que de la performance sur les trois cas tests étudiés. On a donc **sélectionné** cet algorithme **pour la minimisation de la fonction coût des expériences 4DVAR** présentés dans ce mémoire.

Troisième partie

Expériences d'assimilation de données pour la simulation des cœurs

6

Expériences simples d'assimilation de données

On propose d'étudier dans ce chapitre quelques expériences "simples" d'assimilation de données dans le but de mieux appréhender le processus d'analyse en fonction des différents ingrédients qui le composent : modélisation des matrices de covariance d'erreur, poids des observations et de l'ébauche, taille de la fenêtre d'assimilation par exemple. Les chapitres suivants présentent deux cas concrets d'application où ces éléments sont variables d'un cas à l'autre.

Dans un premier temps, on propose d'étudier en dehors de tout processus d'assimilation, les caractéristiques de la dynamique xénon/iode. On justifie ensuite le choix des observations et la modélisation du terme d'ébauche. On s'intéresse enfin au poids relatif de l'ébauche et des observations.

6.1 Études préliminaires

On cherche à étudier le comportement de la dynamique couplée xénon-iode avant la mise en place d'expériences d'assimilation de données. On montre tout d'abord que le comportement du cœur vis-à-vis d'une perturbation dépend de son avancement dans le cycle, c'est-à-dire de son irradiation. On s'intéresse dans un second temps à évaluer les constantes de temps de la dynamique xénon dans le but de déterminer la taille de la fenêtre d'assimilation la plus pertinente.

6.1.1 Comportement du cœur en fonction de son irradiation

On propose d'étudier l'évolution d'une perturbation sur les concentrations initiales du système dynamique xénon-iode en fonction de l'irradiation du cœur. On réalise deux simulations *si* et *sii* se distinguant par la donnée des concentrations initiales de xénon et d'iode (voir figure 6.1). Aucun de ces deux couples de concentrations initiales ne correspond aux concentrations à l'équilibre. Lorsque le transitoire xénon n'est pas initialisé par les concentrations à l'équilibre, on voit apparaître une oscillation xénon qui soit s'amortit, soit s'amplifie en fonction des caractéristiques du cœur. On souhaite comparer l'évolution de ces deux simulations pour d'une part, un cœur en milieu de cycle et pour d'autre part, un cœur en fin de cycle.

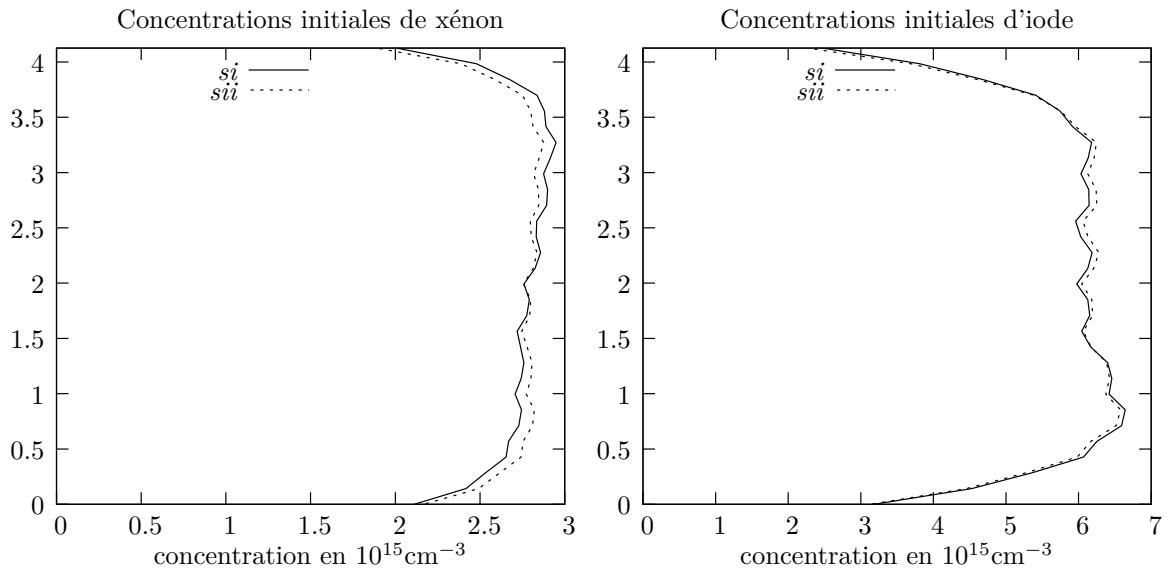


FIG. 6.1. Concentrations initiales des simulations *si* et *sii*.

Cœur en fin de cycle

Un cœur en fin de cycle a un combustible usé. L'usure du combustible est modélisée par un profil 1D d'irradiation donné en entrée du code CIREP1D. Les constantes neutroniques calculées dans le module de contre-réactions dépendant du niveau d'irradiation, il est ainsi possible de modifier les propriétés du cœur (cœur plus ou moins réactif, par exemple) en jouant sur le profil d'irradiation. Pour un cœur usé, il s'ensuit :

- une moindre réactivité,
- une concentration en bore critique presque nulle,

- une plus grande sensibilité aux oscillations axiales de xénon et donc une dynamique divergente en cas de perturbation.

On donne respectivement dans les figures 6.2 et 6.3 le tracé des axial offsets de puissance et xénon ainsi que celui de la concentration en bore critique en fonction du temps (les concentrations initiales de xénon et d'iode sont données dans la figure 6.1).

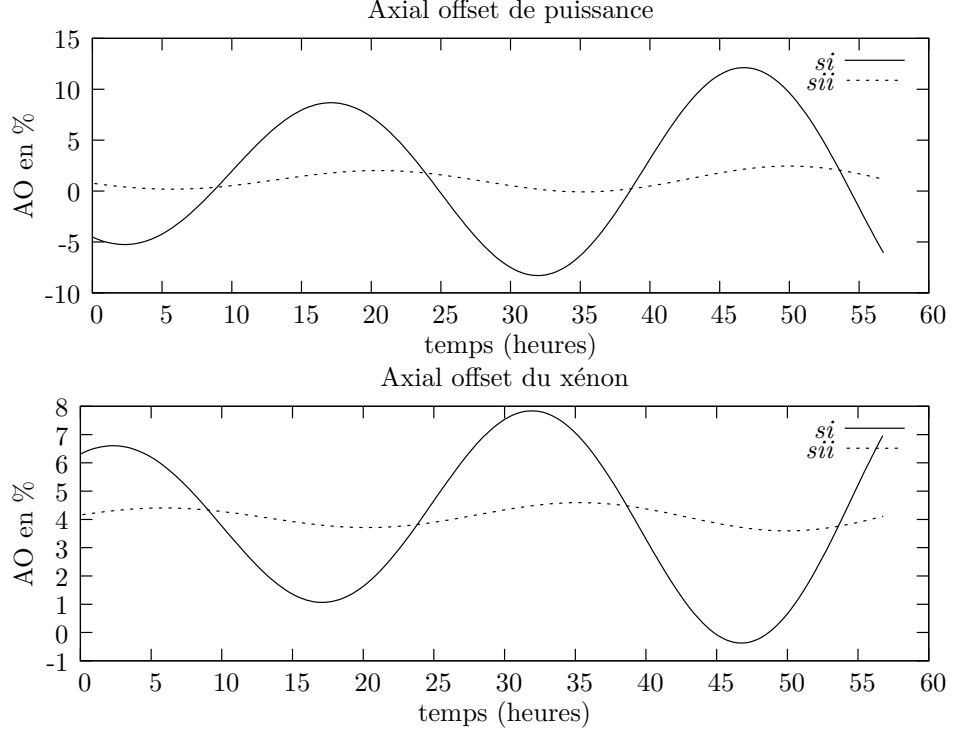


FIG. 6.2. Axial offset de puissance et xénon des deux simulations (on rappelle que l'axial offset de puissance est la différence des puissances produites dans les moitiés supérieure et inférieure du cœur rapportée à la puissance totale dégagée par le réacteur $\frac{P_H - P_B}{P_H + P_B}$). Le cœur est en fin de cycle.

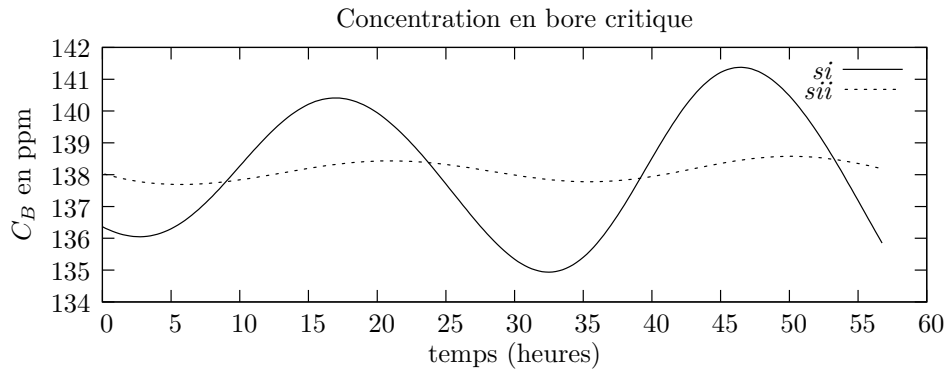


FIG. 6.3. Évolution de la concentration en bore critique pour les deux simulations. Le cœur est en fin de cycle.

On constate que les axial offsets de puissance et de xénon s'amplifient au cours du temps. Cette amplification semblant plus importante pour la simulation *si*, il s'ensuit une augmentation

de l'écart entre ces deux simulations. Pour étayer cette remarque, on présente dans la figure 6.4 les écarts des champs de xénon et d'iode des deux simulations. Ces écarts suivent une dynamique oscillatoire non amortie.

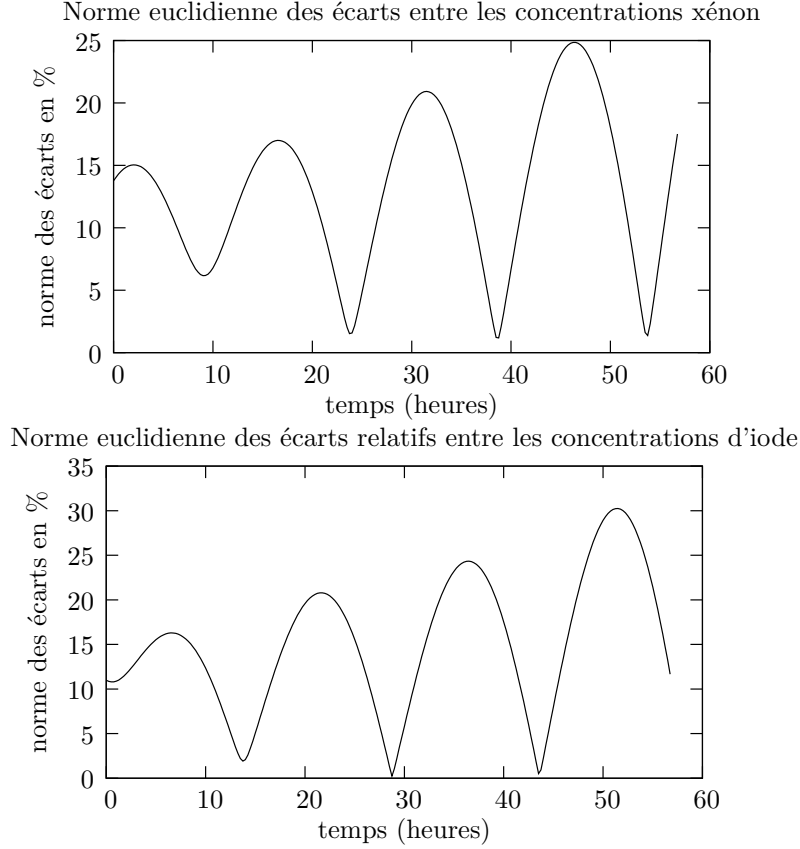


FIG. 6.4. Norme euclidienne (norme L^2) des écarts xénon $\|abs(C_{Xe}^{si}(z) - C_{Xe}^{sii}(z)) / C_{Xe}^{si}(z)\|_2$ et iode $\|abs(C_I^{si}(z) - C_I^{sii}(z)) / C_I^{si}(z)\|_2$ en valeur absolue entre les simulations si et sii . Le cœur est en fin de cycle.

Cœur en milieu de cycle

On souhaite vérifier à présent que les oscillations sont convergentes pour un cœur en milieu de cycle¹⁰. On constate que les axial offsets de puissance et de xénon suivent un régime amorti (figure 6.5). D'autre part, l'écart entre ces deux simulations se réduit au cours du temps (figure 6.6).

En résumé : Ces expériences montrent que la dynamique xénon/iode réagit différemment à une perturbation initiale en fonction de l'état d'avancement du cœur dans le cycle.

¹⁰Simuler un cœur en début de cycle aurait été équivalent pour le but recherché.

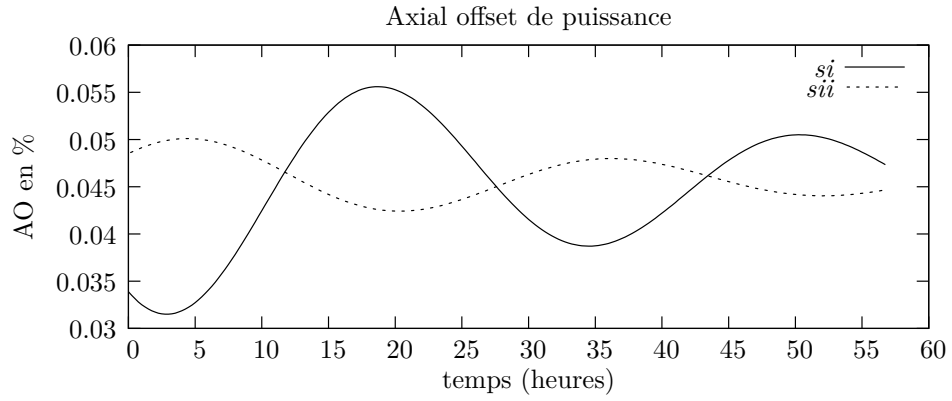
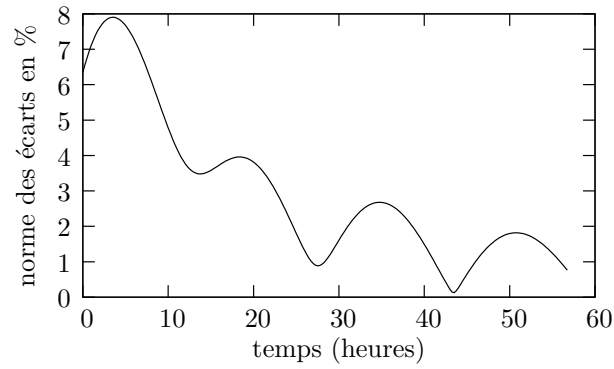


FIG. 6.5. Axial offset de puissance pour les deux simulations dans le cas du cœur en milieu de vie : le régime est à présent amorti.

Norme euclidienne des écarts entre les concentrations de xénon



Norme euclidienne des écarts entre les concentrations d'iode

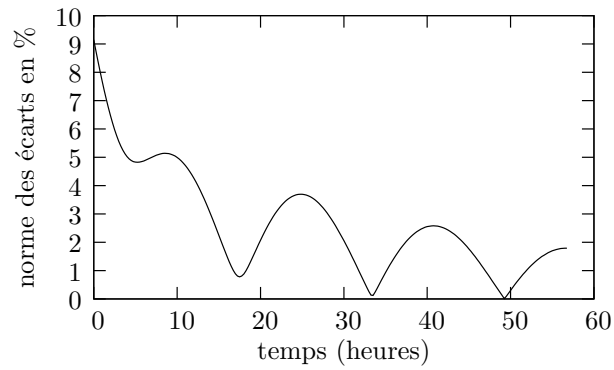


FIG. 6.6. Norme euclidienne (norme L^2) des écarts xénon $\|abs(C_{Xe}^{si}(z) - C_{Xe}^{sii}(z)) / C_{Xe}^{si}(z)\|_2$ et iode $\|abs(C_I^{si}(z) - C_I^{sii}(z)) / C_I^{si}(z)\|_2$ en valeur absolue entre les simulations *si* et *sii*. Le cœur est en milieu de cycle.

6.1.2 Caractéristiques temporelles de la dynamique xénon/iode

On cherche une indication sur la taille optimale de la fenêtre d'assimilation, dans les constantes de temps de la dynamique xénon/iode. Ces dernières sont reliées aux constantes de décroissance du xénon et de l'iode dont les valeurs utilisées par défaut dans l'ensemble des expériences présentées dans ce mémoire sont :

$$\begin{aligned}\lambda_{Xe} &= 2.1 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}, \\ \lambda_I &= 2.93 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}.\end{aligned}$$

Dans ce but, on étudie un transitoire où la puissance et les barres sont maintenues constantes pendant toute la durée de la simulation. On réalise deux simulations de ce transitoire notées *ai* et *aii*. Ces deux simulations se distinguent par la donnée des concentrations initiales de xénon et d'iode : elles partagent la même concentration initiale de xénon mais pas la même concentration initiale d'iode (figure 6.7).

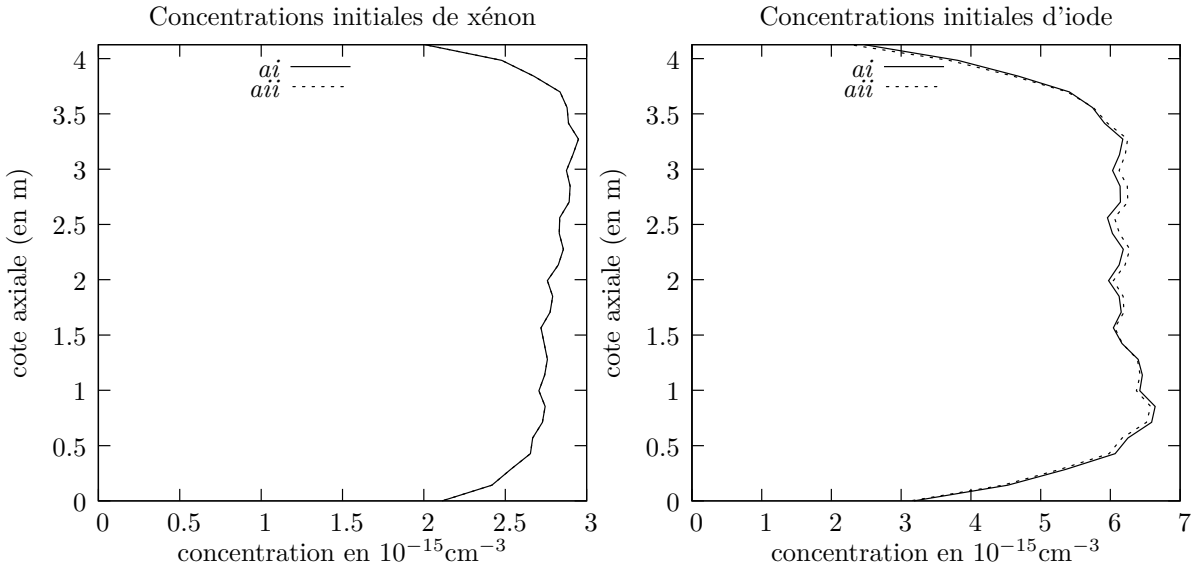
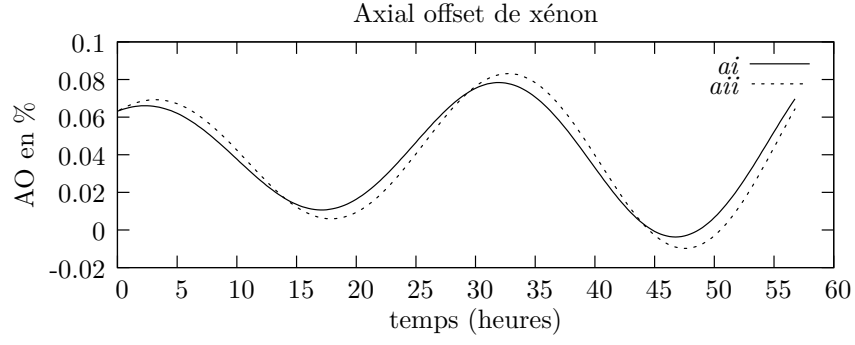
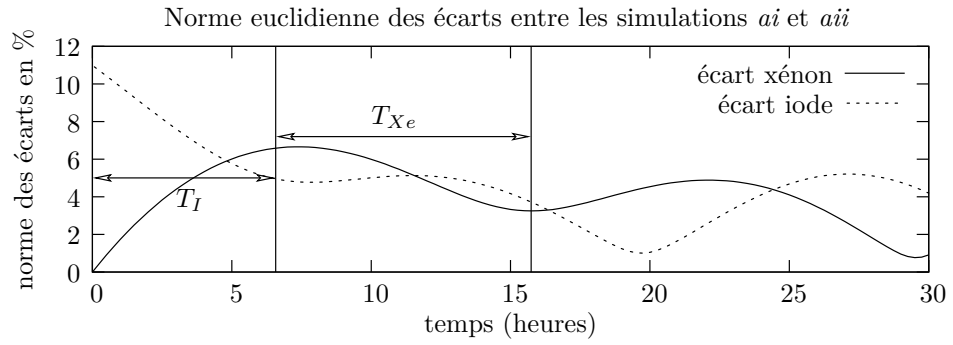


FIG. 6.7. Concentrations initiales des simulations *ai* et *aii*. Les concentrations initiales de xénon sont identiques.

On remarque dans la figure 6.8, une amplification de l'oscillation dans les deux simulations. La fréquence de ces oscillations est réglée par les constantes de décroissance du xénon et de l'iode : si ces constantes étaient plus élevées, la fréquence d'oscillation aurait également été plus élevée. Si on observe bien la figure 6.8, on note que l'écart entre les deux axial offsets de xénon n'est pas constant au cours du temps. De même, l'écart entre les champs de concentration xénon et iode calculés par les simulations *ai* et *aii* peut s'amplifier ou se réduire au cours du temps (figure 6.9). L'écart entre les deux simulations suit lui-même un mouvement oscillatoire. Sa fréquence est identique à celle des oscillations xénon-iode qui est elle-même réglée par les constantes de décroissance.

On souhaite montrer que la dynamique xénon-iode a une mémoire limitée dans le temps. Dans ce sens, on étudie l'évolution d'une perturbation **locale** $\delta \mathbf{X}(t_0)$ sur l'état initial, à l'aide du linéaire tangent de CIREP1D : on choisit une perturbation de 20% sur la 7ème composante des vecteurs concentrations de xénon et d'iode (la 7ème composante se situe dans la partie in-


 FIG. 6.8. Axial offset de xénon des simulations *ai* et *aii*.

 FIG. 6.9. Sur un intervalle de 30 heures, norme euclidienne (norme L^2) des écarts xénon $\|abs(C_{Xe}^{ai}(z) - C_{Xe}^{aii}(z)) / C_{Xe}^{ai}(z)\|_2$ et iode $\|abs(C_I^{ai}(z) - C_I^{aii}(z)) / C_I^{ai}(z)\|_2$ en valeur absolue, entre les deux calculs *ai* et *aii*. On a reporté sur les figures les temps de demi-vie de l'iode et du xénon ($T = \ln(2)/\lambda$).

férieure du cœur mais le choix de la composante n'influe pas sur les résultats).

On représente dans la figure 6.10 l'évolution au cours du temps du rapport $\|\delta\mathbf{X}(t)\|/\|\delta\mathbf{X}(t_0)\|$. On observe une atténuation de 50% de la perturbation initiale au bout de 3 heures et demi environ pour le xénon et au bout de 6 heures pour l'iode. On note que l'évolution de cette perturbation semble également suivre un mouvement oscillatoire puisqu'un début d'amplification de cette perturbation apparaît au bout d'une douzaine d'heures pour la composante xénon.

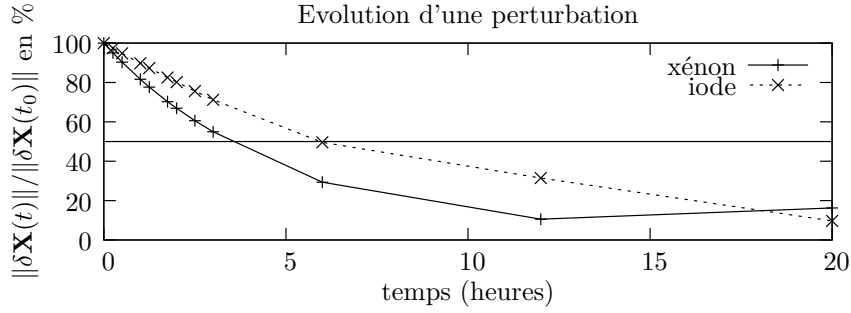


FIG. 6.10. Évolution pour différents temps d'une perturbation locale sur l'état initial. La perturbation initiale d'une valeur de 20% s'applique sur la 7ème composante des vecteurs concentrations 1D de xénon et d'iode. Le transitoire modélisé correspond à un régime oscillatoire divergent.

Dans la figure 6.11, on étudie la dispersion de cette perturbation aux autres composantes. On constate qu'elle s'amortit au bout d'une dizaine d'heures.

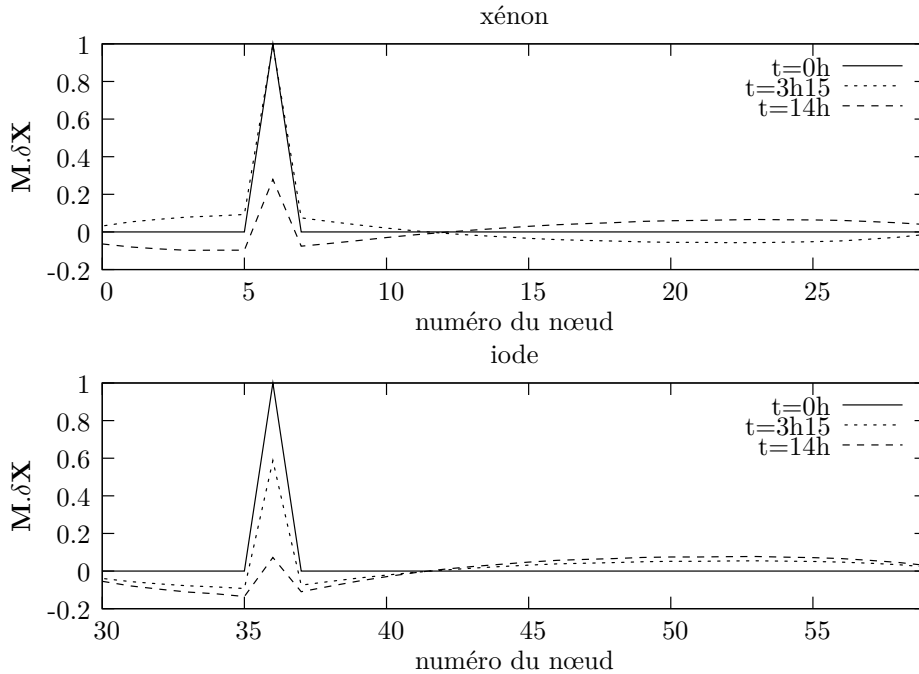


FIG. 6.11. Évolution spatiale à trois temps (0h, 3h15 et 14h) d'une perturbation locale appliquée à l'état initial. Au fil du temps, la perturbation perd en intensité et en même temps se propage aux autres composantes du vecteur d'état. Le transitoire modélisé correspond à un régime oscillatoire divergent.

En conclusion, on constate qu'au-delà d'une dizaine d'heures, les effets d'une perturbation sur les conditions initiales de la dynamique sont moins perceptibles. Il est donc préférable de construire des schémas d'assimilation dont la taille de la fenêtre ne dépasse pas la dizaine d'heures. Cette caractéristique de la dynamique xénon/iode permet de limiter le coût de l'assimilation puisque le modèle ne devrait être évalué que sur des intervalles de temps inférieurs à la dizaine d'heures (en pratique entre 3 et 6 heures).

6.1.3 Présentation du cadre des expériences et notations utilisées

On précise à présent les conditions dans lesquelles sont menées les expériences d'assimilation présentées dans ce chapitre. Le transitoire simulé est un régime permanent sans suivi de charge où

- la puissance totale dégagée est fixée à 3000 MW,
- les grappes de commande sont insérées de 37.7 cm dans le cœur actif.

L'état d'irradiation du cœur correspond à un cœur en fin de cycle (les oscillations xénon suivent donc un régime non amorti). Ce régime permanent est initialisé non pas par les concentrations à l'équilibre du xénon et de l'iode mais par des concentrations issues d'une précédente simulation. L'état vrai et l'ébauche sont ainsi les concentrations finales obtenues pour cette précédente simulation avec deux termes de forçage voisins mais non identiques. L'erreur d'ébauche pour le xénon est de moyenne presque nulle (0.0032) et d'écart-type 0.084 (ce qui correspond à un écart-type de 2.7%); l'erreur d'ébauche pour l'iode est de moyenne également presque nulle (-0.00125) et a un écart type de 0.19 (2.8%).

Le vecteur de contrôle est composé des 30 valeurs de concentration de xénon et d'iode aux 30 nœuds du maillage 1D du cœur actif soit en tout de 60 scalaires. Sauf avis contraire, le vecteur des observations de taille 8 est composé :

- de 6 valeurs de puissance combustible intégrée sur 5 mailles consécutives (indice p),
- de 1 valeur de l'axial offset de puissance (indice AO),
- de 1 valeur de la concentration en bore critique (indice b).

Les incertitudes sur ces trois types de mesures sont les suivantes

$$\begin{cases} \sigma_{Rp} = 30\%, \\ \sigma_{RAO} = 10\%, \\ \sigma_{Rb} = 1\%, \end{cases} \quad (6.1)$$

Sauf cas particuliers, les mesures sont bruitées¹¹ dans ce chapitre à la hauteur des incertitudes mentionnées dans (6.1).

Les expériences débutent au temps $t_0 = 7200$ secondes. La taille de la fenêtre d'assimilation du 4DVAR est fixée dans l'ensemble des expériences à trois heures et la fréquence des observations varie de 30 minutes à trois heures.

Puisque l'opérateur d'observation ne nécessite pas la connaissance de la concentration d'iode, le schéma 3DVAR, qui ne contient pas de dimension temporelle, ne permet pas de contrôler la concentration initiale d'iode.

¹¹Le bruit introduit dans les mesures est un bruit gaussien.

Dans la suite, on désigne par incrément vrai, le vecteur $\delta\mathbf{X}^t$ défini par

$$\delta\mathbf{X}^t = \mathbf{X}^t - \mathbf{X}^b,$$

et incrément d'analyse le vecteur $\delta\mathbf{X}^a$ défini par

$$\delta\mathbf{X}^a = \mathbf{X}^a - \mathbf{X}^b.$$

L'erreur totale d'analyse est calculée selon la formule

$$E^{totale} = \sqrt{\sum_{i=0}^{n_{obs}-1} \langle \mathbf{X}^a(t_i) - \mathbf{X}^t(t_i), \mathbf{X}^a(t_i) - \mathbf{X}^t(t_i) \rangle}$$

où \langle, \rangle représente le produit scalaire usuel. Le calcul de l'erreur totale d'analyse est possible parce que dans le cadre des expériences jumelles, l'état vrai $\mathbf{X}^t(t)$ est connu.

6.2 Nature et rôle des observations

Le cadre de l'expérience reste identique à celui présenté en 6.1. On commence par présenter les analyses obtenues par assimilation des puissances combustibles axiales intégrées pour montrer la nécessité d'enrichir le vecteur d'observation des informations scalaires d'axial offset et de concentration en bore. On présente ensuite les améliorations apportées par la prise en compte de ces deux scalaires.

6.2.1 Assimilation d'un profil 1D de puissance

On se place ici dans un cadre idéal où l'on dispose d'une mesure de puissance à chaque nœud du maillage 1D sur lequel sont discrétisés les champs de concentrations xénon et iode : il n'y a donc pas de perte d'information spatiale. La taille n du vecteur de contrôle constitué des concentrations 1D de xénon et d'iode est donc exactement égale au double de la taille p du vecteur d'observation. Pour ne conserver que la sensibilité de l'analyse aux observations, on ne prend pas en compte de terme d'ébauche. Avec deux temps de mesures, le système d'assimilation ainsi construit est déterminé, et au-delà est sur-déterminé. On présente dans la figure 6.12 les incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 obtenus d'une part avec 2 temps d'observation et d'autre part avec 6 temps d'observation : on constate que les incréments d'analyse sont quasiment confondus avec les incréments vrais (environ 0.4 % d'erreur maximum sur le xénon et l'iode). En conclusion, si on disposait de mesures exactes de puissance en chaque nœud du maillage, on serait en mesure de retrouver l'état initial vrai du système avec seulement 2 temps d'observation et ce, sans terme d'ébauche ! On va voir un peu plus loin que, si les mesures sont en revanche entachées d'erreur, il faut introduire plus de mesures dans le système d'assimilation pour retrouver une approximation satisfaisante de l'état initial. On verra également dans ce cas le rôle que joue l'ébauche.

Dans la réalité, les mesures de puissance ne peuvent pas être connues en chaque nœud du maillage 1D de CIREP1D. On dispose seulement de mesures de puissance intégrée sur plusieurs mailles. On souhaite connaître la perte de qualité de l'incrément d'analyse lors du passage de ces 30 mesures de puissance locale à 6 mesures de puissance intégrée. On donne dans la figure 6.13, les incréments d'analyse de xénon et d'iode pour les cas $n_{obs} = 2$ et 13. On constate

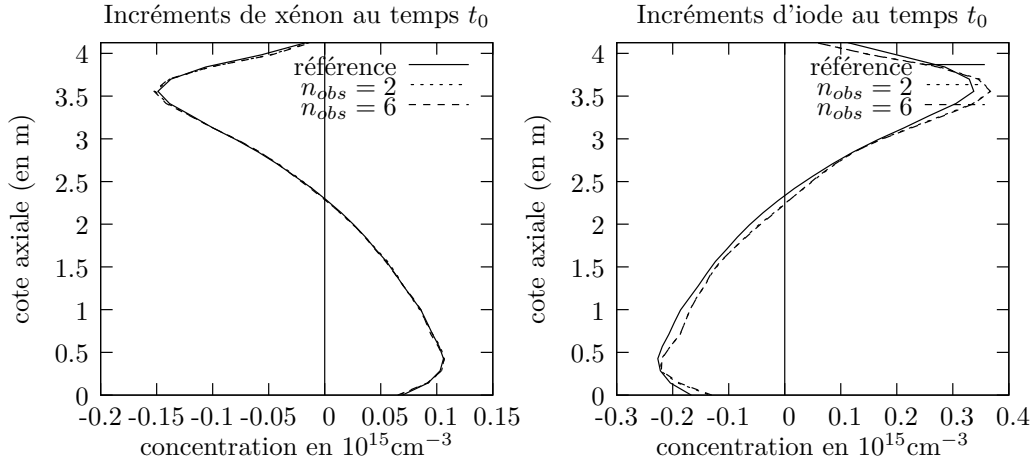


FIG. 6.12. Incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus par assimilation de 30 mesures exactes du champ 1D de puissance combustible pour 2 temps d'observation dans le premier cas (système déterminé) et pour 6 temps d'observation dans le second cas (système sur-déterminé). La fenêtre d'assimilation est de 3 heures. L'ébauche n'est pas prise en compte dans la fonction coût.

comme précédemment que, lorsque les mesures ne sont pas entachées d'erreur, l'ajout de mesures supplémentaires dans le système ne change pas la qualité des incréments d'analyse. On remarque cependant que cette fois, les extrema des incréments de référence ne sont plus correctement approchés. Pourtant la valeur de la fonction coût au minimum est quasi nulle : le système est donc complètement recalé sur les observations. On en déduit que le passage de 30 mesures de puissance locales à 6 mesures de puissance intégrée implique une petite dégradation de la qualité de l'incrément d'analyse dû à l'effet de moyenne (voir figure 6.14 où l'on a représenté les mesures utilisées au temps t_0 en même temps que le profil exact de puissance) et notamment sur les extrema qui peuvent être sur ou sous-estimés comme le montre la figure 6.13.

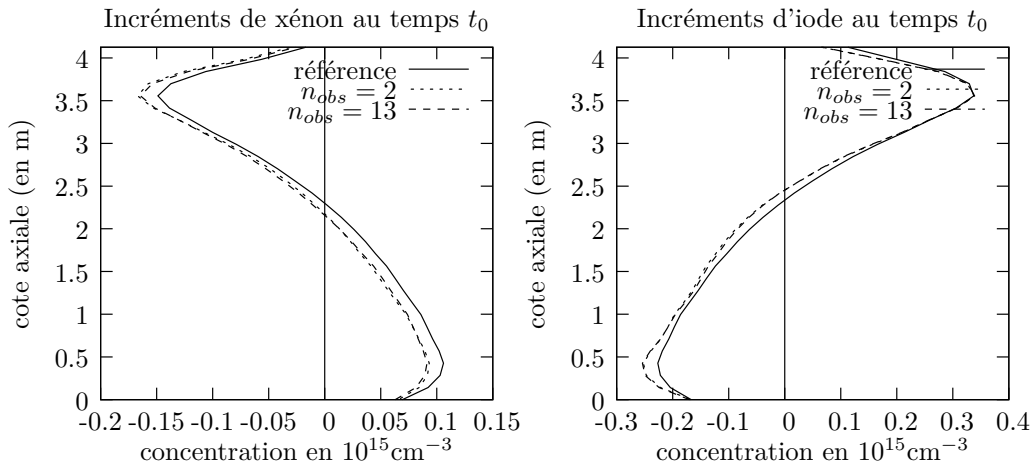


FIG. 6.13. Incréments de xénon et d'iode au temps initial t_0 en fonction du nombre de temps d'observation. On constate que les incréments d'analyse sont quasi confondus. Les variables assimilées par temps d'observation sont les 6 mesures exactes de puissance intégrée. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures. L'ébauche n'est pas prise en compte dans la fonction coût.

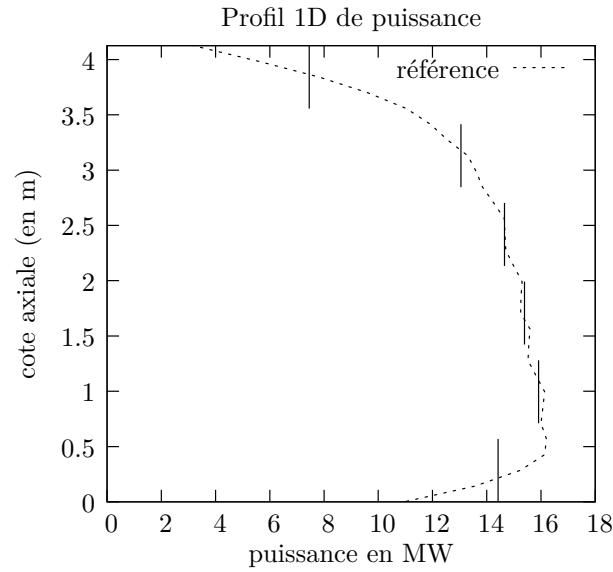


FIG. 6.14. Profil 1D de puissance de référence au temps t_0 (en pointillé) et observations (puissance intégrée) utilisées dans l'assimilation (en trait plein).

On vient de voir qu'avec seulement 2 séries de 6 mesures exactes de puissance intégrée, les incréments d'analyse sont presque parfaits. On donne dans la figure 6.15 la concentration en bore critique calculée après une expérience portant sur l'assimilation de 6 mesures exactes de puissance intégrée pour 8 temps d'observation. On observe sur cette figure une sur-estimation de la concentration en bore, inférieure à 1 ppm. Cette sur-estimation est tout à fait acceptable du point de vue neutronique. On ne représente pas la trace de l'axial offset de puissance analysé car celle-ci se confond avec la trace de référence. En résumé, si les mesures de puissance pouvaient être exactes, il n'y aurait pas besoin d'autres types de mesure pour compléter le système. On introduit la mesure de l'axial offset de puissance ainsi que celle de la concentration en bore pour compenser la perte d'information liée à la présence d'erreurs importantes dans les mesures de puissance intégrée.

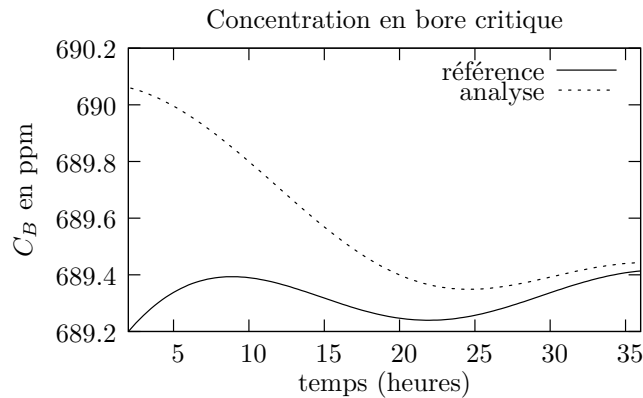


FIG. 6.15. Concentrations en bore critique de référence et analysées. L'expérience porte sur l'assimilation de 6 mesures exactes de puissance intégrée pour 8 temps d'observation. La taille de la fenêtre est de 3 heures.

6.2.2 Prise en compte de mesures de la concentration en bore

On compare dans la figure 6.16 les concentrations en bore issues de deux schémas d'assimilation au cours du temps. Dans le premier, seules sont assimilées les mesures de puissance intégrée. Dans le second schéma, on assimile une mesure de concentration en bore en plus des 6 mesures de puissance. Dans les deux cas, la taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et comporte 8 séries d'observation régulièrement espacées. Pour cette étude, les mesures sont bruitées : 30% sur les mesures de puissance intégrée, et 1% sur la concentration en bore. Un "peu" d'ébauche est introduit afin de régulariser le système (voir section suivante). On remarque une meilleure approximation de la concentration en bore au temps initial dans le schéma où le bore est assimilé. Pour ce schéma, la diminution de 2 ppm de l'estimation du bore en t_0 par rapport à l'autre schéma se traduit par une légère élévation du niveau global de xénon comme on peut le voir dans la partie gauche de la figure 6.17. Pourtant, si on regarde les champs 1D de puissance calculés avec les deux schémas (partie droite de la figure 6.17), on constate qu'ils sont corrigés de manière identique. On en déduit qu'il existe un lien entre le niveau global de xénon et la concentration en bore requise pour rendre critique le cœur.

Le bore est un poison neutronique dilué dans l'eau du circuit primaire qui permet d'agir sur la réactivité du cœur. Son action est homogène sur tout le cœur. Le xénon est également un poison neutronique mais son action est locale. D'autres produits de fission peuvent jouer le rôle de poison neutronique mais dans CIREP1D, le niveau d'empoisonnement du cœur est seulement fonction du bore et du xénon (on exclut les grappes de commande qui sont vues comme un terme de forçage). Deux transitoires initialisés avec le même profil 1D de xénon, mais avec deux niveaux d'empoisonnement proches bien que différents peuvent donc donner des champs de puissance voisins sur un intervalle de quelques heures. La différence d'empoisonnement initial dû au xénon est alors compensée par un niveau de concentration en bore critique différent : là où il y avait plus de xénon, on trouve une concentration en bore critique plus faible comme on vient de le voir. Du point de vue de l'assimilation, le bore peut donc être une variable d'ajustement cachée permettant de compenser un excès ou un manque d'empoisonnement lié au xénon. C'est pour éviter un tel phénomène qu'on introduit la mesure de la concentration en bore dans le vecteur d'observation.

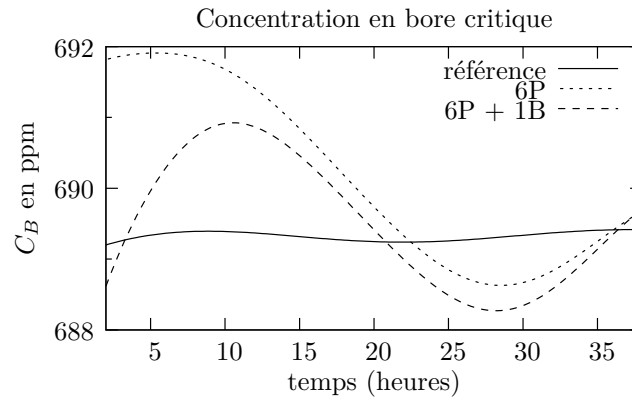


FIG. 6.16. Concentrations en bore issues de deux schémas d'assimilation au cours du temps. Dans le premier, seules sont assimilées les mesures de puissance intégrée (légende 6P). Dans le second schéma, on assimile une mesure de concentration en bore en plus des 6 mesures de puissance (légende 6P+1B). Dans les deux cas, la taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et comporte 8 séries d'observation régulièrement espacées. Les mesures sont bruitées.

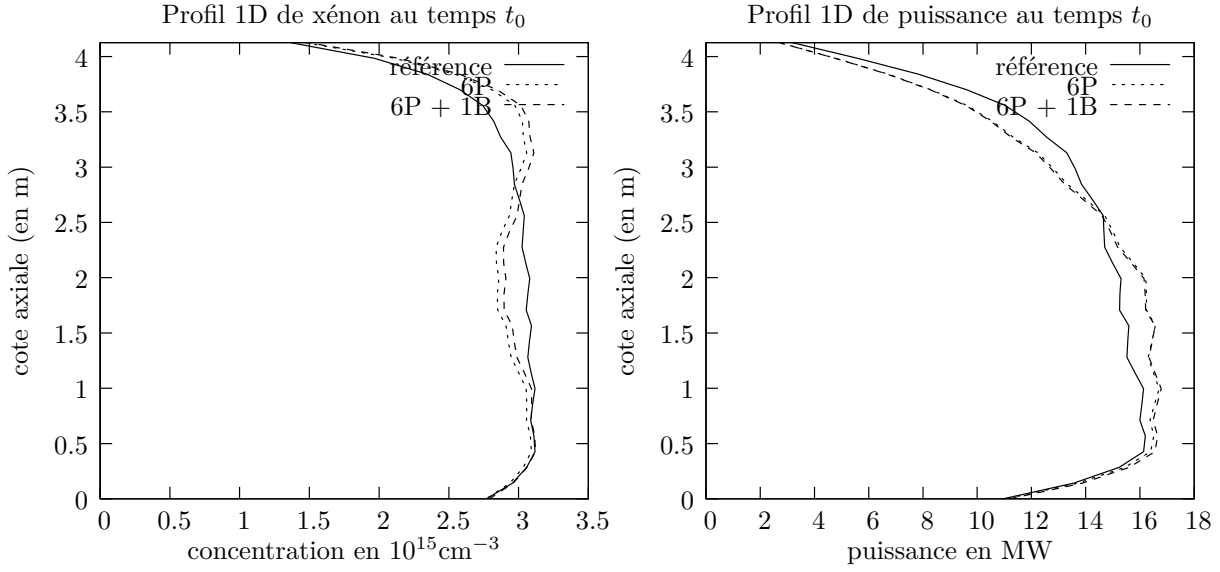


FIG. 6.17. Profils 1D de xénon et de puissance issues des deux schémas d'assimilation. Dans le premier, seules sont assimilées les mesures de puissance intégrée (légende 6P). Dans le second schéma, on assimile une mesure de concentration en bore en plus des 6 mesures de puissance (légende 6P+1B).

6.2.3 Prise en compte de la donnée de l'axial offset de puissance

On rappelle que l'axial offset (ou déséquilibre axial) de puissance est la différence des puissances produites dans les deux moitiés du cœur rapportée à la puissance totale :

$$AO = \frac{P_H - P_B}{P_H + P_B}$$

où $P_H = \int_{\text{moitié sup}} P^{lin}(z) dz$ et $P_B = \int_{\text{moitié inf}} P^{lin}(z) dz$ en W . C'est donc une information de type intégral. L'estimation de l'axial offset de puissance est une donnée importante, puisqu'elle fait partie des contraintes de pilotage (l'axial offset de puissance doit toujours se situer dans une plage de fonctionnement donnée). Assimiler des mesures d'axial offset doit permettre de s'assurer que l'axial offset est correctement estimé même en présence de fortes erreurs de mesure sur les observations de puissance intégrée.

On compare dans la figure 6.18 les traces d'axial offset obtenues à l'issue de 3 expériences d'assimilation. La première ne comporte que des observations de type puissance intégrée, la seconde assimile en supplément des observations de type concentration en bore. La dernière assimile des observations de type puissance intégrée, concentration en bore et axial offset de puissance. Il n'y a toujours pas de terme d'ébauche dans le système d'assimilation et les observations sont bruitées. On rappelle que l'incertitude sur la mesure de l'axial offset est de 10%. On constate que l'assimilation de cette dernière mesure permet d'améliorer significativement l'estimation de l'axial offset. On présente dans la figure 6.19, les incréments d'analyse pour ces 3 expériences. On remarque que l'ajout de cette nouvelle donnée dans le vecteur des observations permet également de corriger un peu mieux les concentrations initiales de xénon et d'iode.

6.2.4 Observations et erreurs de mesure

On a vu à la fin du chapitre 4 qu'en l'absence d'ébauche et si les observations sont exactes, l'erreur d'analyse est extrêmement faible (figure 4.9, page 111). Toujours à la fin de ce chapitre,

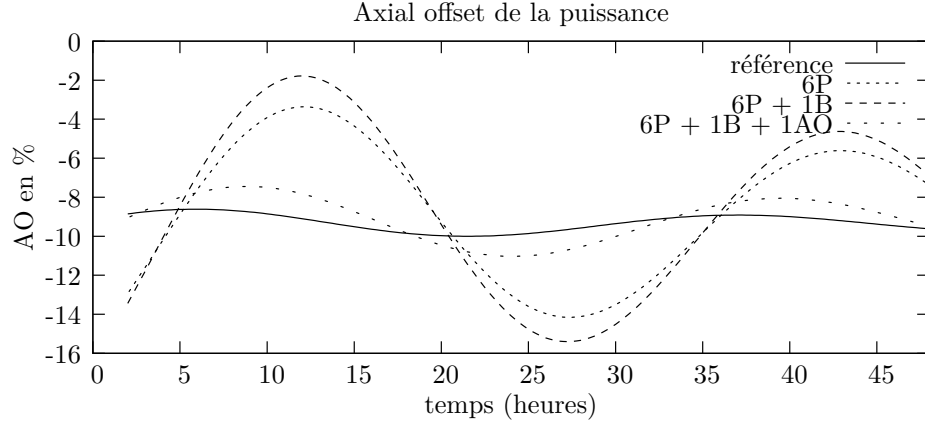


FIG. 6.18. Axial offset de puissance analysé. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8 temps d'observation sont considérés. Dans la première expérience (légende 6P), seules les mesures de puissance intégrée sont assimilées. Dans la seconde (légende 6P+1B), on assimile de plus 1 mesure de concentration en bore. Dans la dernière expérience (légende 6P+1B+1AO), on assimile à chaque temps d'observation, les 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure de concentration en bore et 1 mesure de l'axial offset de puissance.

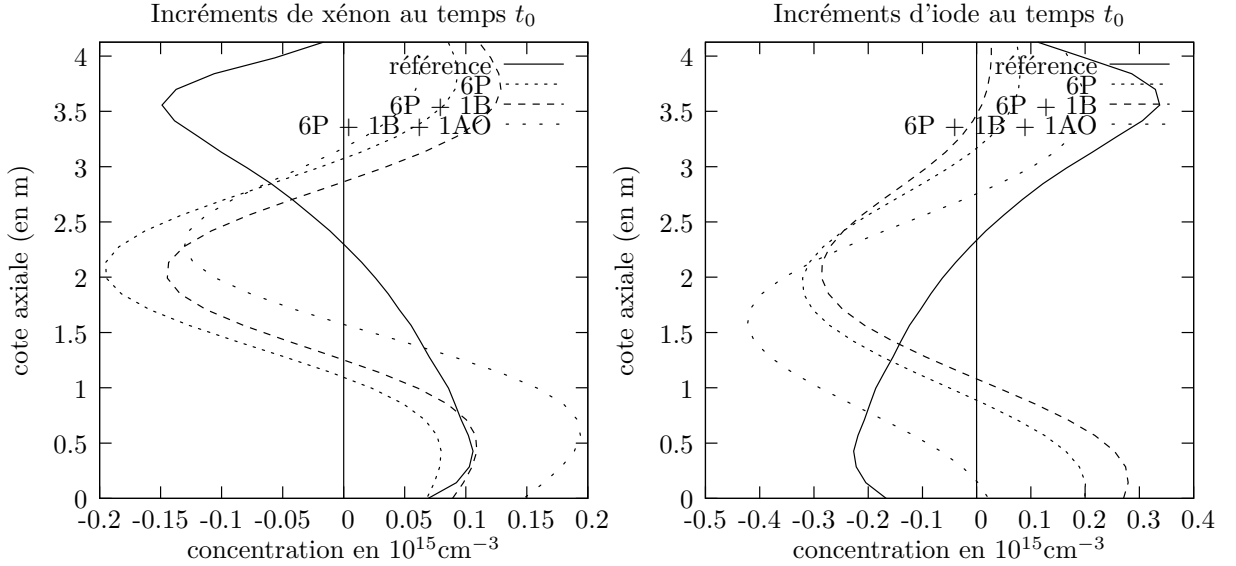


FIG. 6.19. Incréments d'analyse de xénon et d'iode. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8 temps d'observation sont considérés. Dans la première expérience (légende 6P), seules les mesures de puissance intégrée sont assimilées. Dans la seconde (légende 6P+1B), on assimile de plus 1 mesure de concentration en bore. Dans la dernière expérience (légende 6P+1B+1AO), on assimile à chaque temps d'observation, les 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure de concentration en bore et 1 mesure de l'axial offset de puissance.

on a également montré la dégradation de la qualité des incréments d'analyse au fur et à mesure qu'on introduisait des erreurs dans les mesures (figure 4.12). On souhaite étudier à présent l'influence de l'aléa introduit dans les mesures.

Les erreurs introduites dans les mesures sont obtenues avec l'aide du logiciel SCILAB¹². Ces erreurs sont calculées avec le générateur de nombres aléatoires de SCILAB suivant une loi normale et correspondent à des données du schéma d'assimilation construit sous la plateforme PALM. Pour 3 ensembles d'erreurs (suivant la même loi de probabilité), on compare les incréments d'analyse obtenus avec l'assimilation de 4 séries d'observation (soit $4 \times \{6P+1AO+1B\}$). On répète cette expérience pour 13 et 25 séries d'observation. L'erreur d'ébauche introduite dans B est identique dans les expériences avec 4 et 13 séries d'observation (5% d'erreur). Elle est moindre dans la dernière expérience (2% d'erreur). Les incréments d'analyse sont présentés dans les figures 6.20, 6.21 et 6.22.

La sensibilité des incréments d'analyse aux aléas introduits dans les mesures est fonction du poids accordé aux observations dans la fonction coût : plus le système est sensible au terme des observations, plus il est sensible à l'aléa introduit dans les mesures. Lorsque le nombre d'observations augmente, comme c'est le cas entre les figures 6.20 et 6.21, le poids des observations augmente dans la fonction coût. On observe alors une plus grande variabilité des incréments d'analyse. Lorsque le nombre d'observations (25×8) est élevé mais que l'ébauche reste importante dans la fonction coût, cette variabilité est moins grande (figure 6.22). On peut noter que l'incrément d'iode semble moins sensible à cet aléa sur les mesures que l'incrément de xénon.

Dans les expériences des deux chapitres suivants, on prend garde à ne comparer les différents schémas d'assimilation proposés que sur les *mêmes* jeux d'observation (c'est-à-dire avec les mêmes erreurs d'observation).

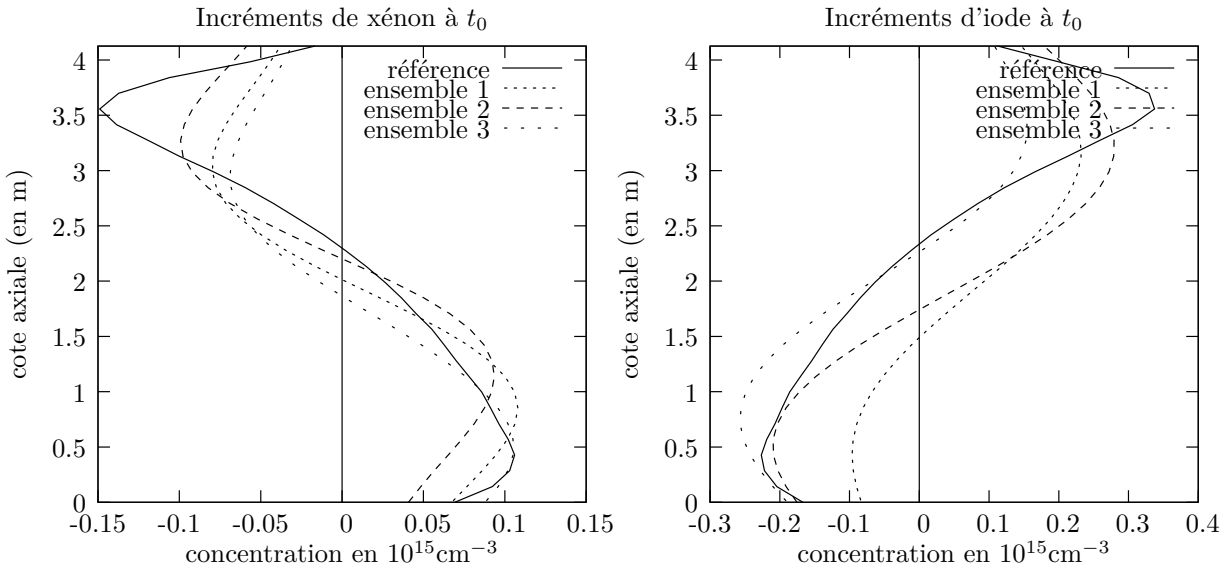


FIG. 6.20. Incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus par assimilation de 4 séries d'observation. Trois expériences d'assimilation sont réalisées avec 3 ensembles de mesures. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures. L'erreur d'ébauche mise dans la matrice B est d'environ 5%.

¹²<http://www.scilab.org>

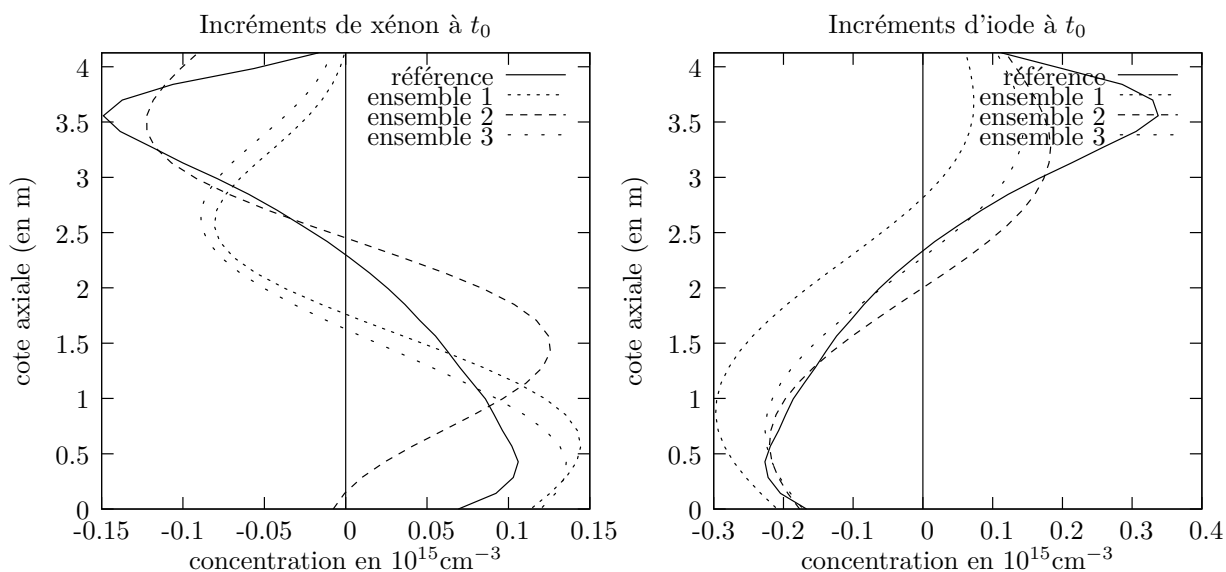


FIG. 6.21. Incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus par assimilation de 13 séries d'observation. 3 expériences d'assimilation sont réalisées avec 3 ensembles de mesures. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures. L'erreur d'ébauche mise dans la matrice B est d'environ 5%.

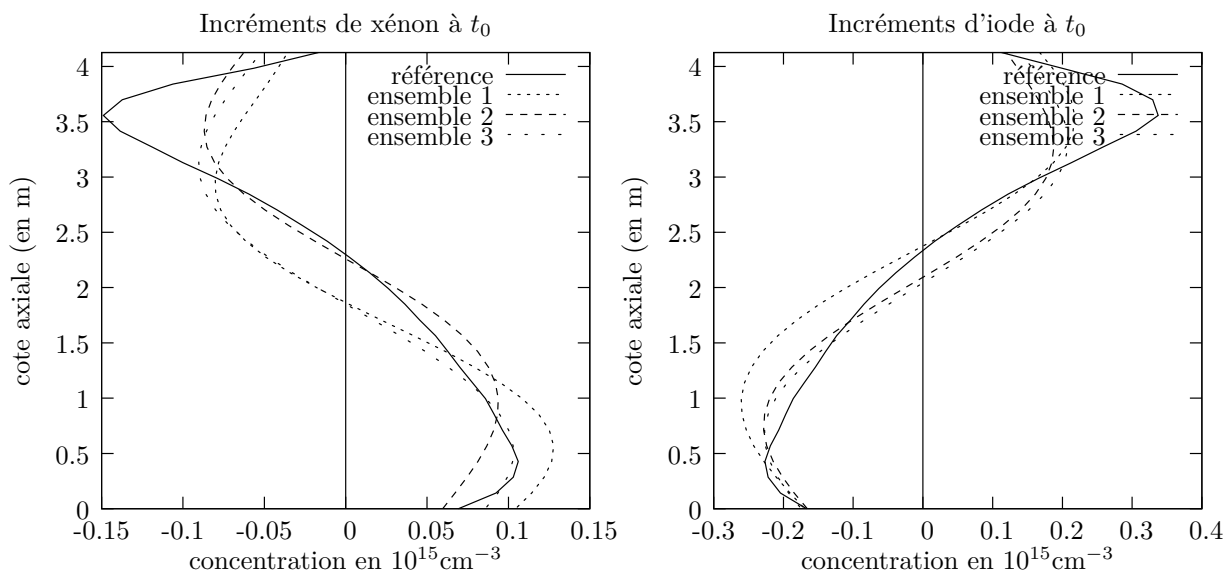


FIG. 6.22. Incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus par assimilation de 25 séries d'observation. 3 expériences d'assimilation sont réalisées avec 3 ensembles de mesures. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 6 heures. L'erreur d'ébauche mise dans la matrice B est d'environ 2%.

6.3 Forme et influence du terme d'ébauche

Le chapitre 4 décrit les différentes composantes de la chaîne d'assimilation et notamment le vecteur d'ébauche et la matrice de covariances d'erreur d'ébauche \mathbf{B} . On rappelle que le choix de la modélisation de \mathbf{B} s'est porté sur une représentation univariée où les corrélations entre les erreurs d'ébauche xénon et iode ne sont pas prises en compte. Pour chaque bloc univarié, on modélise cependant des corrélations spatiales à l'aide de la fonction de corrélation de Balgovind [Gas99]. Il reste à présent à déterminer la portée de la corrélation fixée par l'échelle de corrélation L .

6.3.1 Rôle de l'ébauche

On a vu précédemment qu'en présence de mesures exactes, il suffisait de disposer d'autant de mesures que de paramètres à recaler pour retrouver l'état initial du système dynamique (aux erreurs numériques près). Lorsqu'on introduit des erreurs dans les mesures, il devient impossible de retrouver exactement l'état initial et ce, même avec un système déterminé ou sur-déterminé en observations. Et si les mesures sont fortement entachées d'erreur, on risque d'obtenir à l'issue du processus d'assimilation, une analyse qui n'est pas satisfaisante du point de vue physique. On illustre un tel phénomène dans la figure 6.23 où on a assimilé 4×8 mesures (6 mesures de puissance, 1 mesure d'axial offset et 1 mesure de concentration en bore pour 4 temps d'observation) sur une fenêtre de 3 heures sans prise en compte de terme d'ébauche. On a utilisé pour la première analyse des mesures exactes, pour la seconde des mesures comportant 0.5% d'erreur et pour la troisième et dernière analyse, des mesures de puissance intégrée comportant 30% d'erreur, des mesures d'axial offset comportant 10% d'erreur et des mesures de concentration en bore contenant 1% d'erreur (valeurs utilisées par défaut dans l'ensemble des expériences de ce mémoire). Avec 0.5% d'erreur, on observe seulement un changement en amplitude et position des extrema des incréments d'analyse. Dans le troisième cas, les incréments d'analyse ne ressemblent plus du tout aux incréments vrais.

Pour corriger ce point, on utilise dans la chaîne d'assimilation, une ébauche de l'état de la dynamique pour “guider” le processus d'analyse vers une solution physiquement plus acceptable. Du point de vue numérique, l'ébauche joue également d'autres rôles. Elle sert d'une part de point de départ à l'algorithme de minimisation. On a vu à ce sujet, dans le chapitre 5, que le choix du point de départ est très important pour le succès de la minimisation. Elle permet d'autre part d'abaisser le coût de la minimisation en améliorant le conditionnement de la matrice hessienne.

En fonction du poids qu'on lui attribue dans la fonction coût, l'ébauche joue plus ou moins bien ces différents rôles. Ce poids est fixé par l'intermédiaire de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} dont on justifie ci-après les choix de construction.

6.3.2 Mise en place des corrélations spatiales dans \mathbf{B}

Motivations

Par définition, les corrélations spatiales correspondent à la modélisation de l'interdépendance des erreurs commises sur les différentes composantes du vecteur concentration d'ébauche. Ces corrélations sont naturellement présentes dans le modèle de CIREP1D : une perturbation sur une composante du vecteur de concentration initiale, se propage sur les autres composantes au cours du temps comme le montre la figure 6.24.

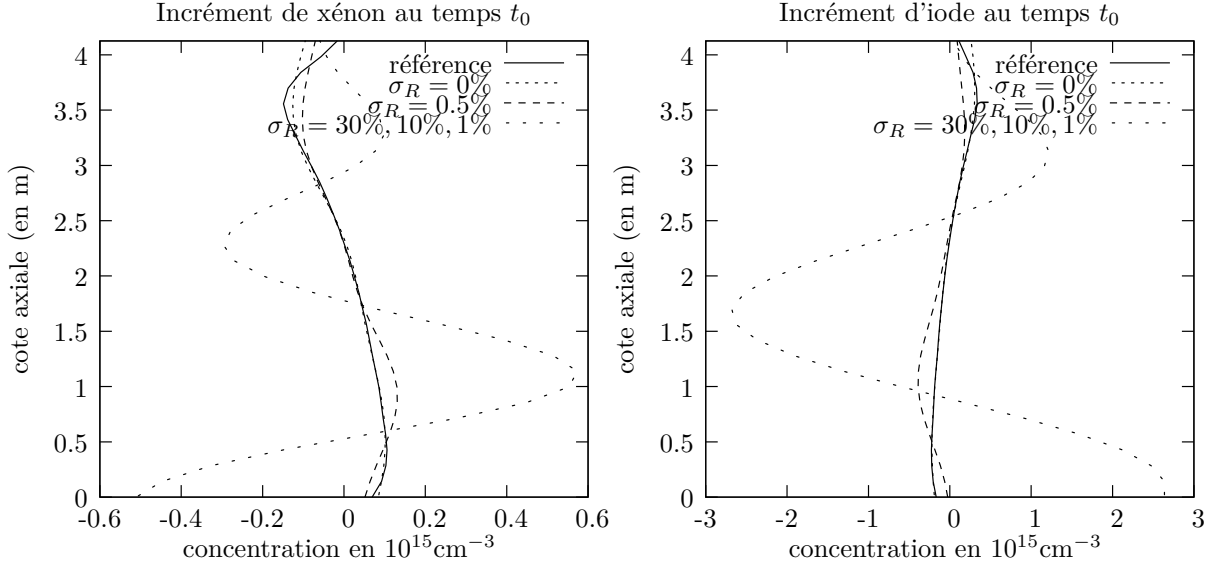


FIG. 6.23. Incréments d'analyse de xénon et d'iode pour une assimilation 4DVAR de 4×8 mesures (6 mesures de puissance, 1 mesure d'axial offset et 1 mesure de concentration en bore pour 4 temps d'observation) sans terme d'ébauche. Dans le premier cas, les mesures sont exactes ($\sigma_R = 0\%$). Dans le second cas, les mesures comportent 0.5% d'erreur ($\sigma_R = 0.5\%$). Dans le troisième cas, les mesures comportent 30% d'erreur pour les puissances, 10% pour l'axial offset et 1% pour la concentration en bore ($\sigma_R = 30\%, 10\%, 1\%$).

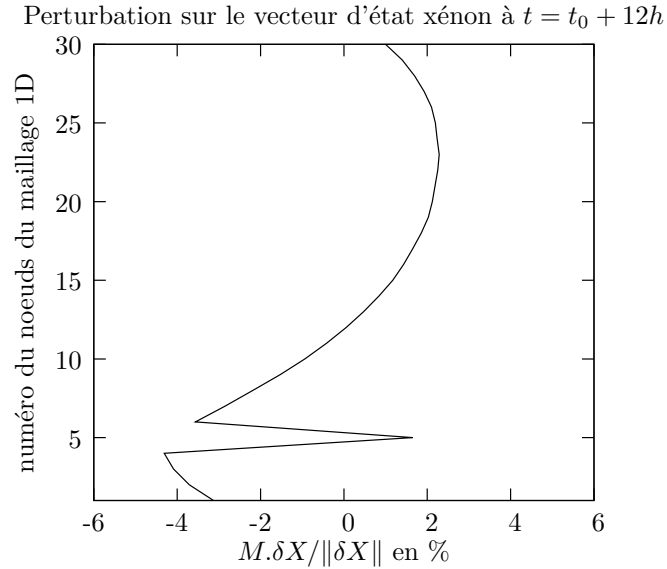


FIG. 6.24. Évolution sur l'ensemble des composantes du vecteur concentration xénon, d'une perturbation sur la 5ème composante du vecteur concentration xénon au temps initial, après 12 heures de simulation : la perturbation s'est considérablement réduite au niveau de la 5ème composante en même temps qu'elle s'est propagée aux autres composantes.

On souhaite donc traduire cette dépendance spatiale dans la matrice \mathbf{B} à l'aide de la fonction de corrélation de Balgovind. Cette fonction dépend d'un réel noté L et appelé échelle de corrélation, qui permet de régler cette dépendance spatiale. Il s'agit à présent de déterminer à quelle valeur fixer l'échelle L .

Effets des corrélations spatiales

Avant de choisir cette valeur de L , on souhaite mettre en avant les effets des corrélations spatiales sur le système d'assimilation. On s'appuie sur l'expérience décrite en 6.1.3 où on fait varier l'échelle de corrélation de 0 à 9. On souhaite attirer l'attention sur la relation existant entre le niveau de corrélation spatial introduit dans \mathbf{B} et le poids de l'ébauche dans la chaîne d'assimilation. En introduisant de la dépendance entre les erreurs commises sur les différentes composantes du vecteur d'ébauche, les corrélations spatiales diminuent l'importance du terme d'ébauche. Ainsi, si on étudie l'écart entre l'analyse et l'ébauche en fonction de l'échelle de corrélation (figure 6.25), on constate que cet écart augmente d'un facteur 4 entre le cas où $L = 1$ et le cas où $L = 8$. En modifiant l'échelle de corrélation, on modifie donc les données du problème d'assimilation.

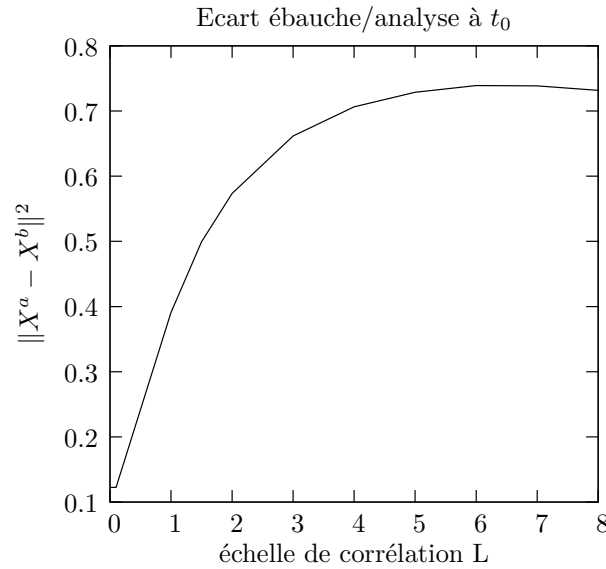


FIG. 6.25. Écart entre l'analyse et l'ébauche $\|X^a - X^b\|^2$ à t_0 en fonction de l'échelle de corrélation. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8×8 mesures (8 temps d'observation) sont assimilées.

Un autre point important à souligner est l'augmentation du coût de la minimisation avec l'augmentation de l'échelle de corrélation. Cette augmentation de L implique

- une réduction du poids de l'ébauche dans la fonction coût,
- une dégradation du conditionnement de la matrice hessienne de la fonction coût.

Ces deux points conduisent à une augmentation du nombre d'itérations nécessaires à la convergence de l'algorithme de minimisation. Cette augmentation est modérée dans la figure 6.26 mais on peut s'attendre à ce que cette augmentation soit bien plus importante pour un système d'assimilation de plus grande taille (cas 3D par exemple).

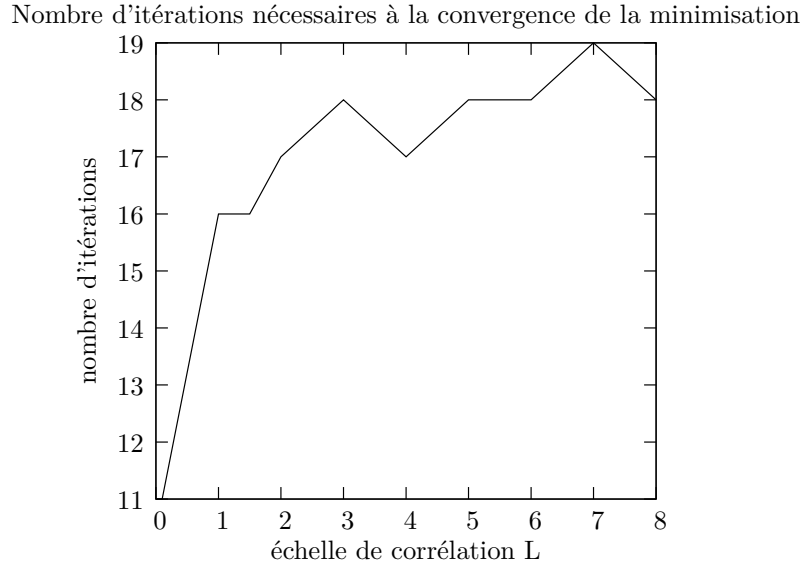


FIG. 6.26. Nombre d'itérations nécessaires pour la convergence de l'algorithme de minimisation en fonction de l'échelle de corrélation L . La minimisation est réalisée avec l'algorithme BFGS avec un critère d'arrêt de 10^{-4} sur la norme du gradient. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8×8 mesures (8 temps d'observation) sont assimilées à l'aide d'un schéma 4DVAR.

Choix de l'échelle de corrélation

En tenant compte des différents éléments présentés précédemment, il s'agit maintenant de choisir une échelle de corrélation L . On présente dans la figure 6.27, les incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps initial obtenus pour les longueurs de corrélation de 0.1, 1, 4 et 9. Au fur et à mesure que l'on augmente L , on observe un ajustement de l'incrément d'analyse de xénon sur l'incrément vrai du point de vue de la position des extrema. Pour l'amplitude des extrema, on constate une bonne approximation de l'incrément vrai en bas du cœur au fur et à mesure que L croît. Ce n'est pas le cas pour la moitié supérieure du cœur. On remarque le même type de comportement pour l'incrément d'iode avec cependant une nette différence entre les incréments d'analyse calculés avec $L = 0.1$ et, $L = 1$ et les incréments calculés avec $L > 1$. La prise en compte d'une longueur de corrélation supérieure à 1 permet donc d'améliorer significativement la qualité de l'incrément d'analyse d'iode.

On vient d'établir une valeur minimale souhaitable pour le paramètre L . Pour fixer une valeur de L , on étudie dans la figure 6.28 l'évolution de la moyenne et de l'écart-type des erreurs xénon et iode au temps initial en fonction de L . On constate un optimum pour une échelle de corrélation entre 4 et 6. Comme on l'a vu précédemment dans le chapitre 4, le conditionnement de \mathbf{B} se dégrade au fur et à mesure qu'on augmente la valeur de L . On choisit de retenir la valeur 4 pour le paramètre L .

6.4 Poids de l'ébauche, poids des observations

Pour conclure cette série d'expériences simples, on propose d'étudier le poids relatif de l'ébauche et des observations dans le problème d'assimilation. On souhaite mettre en évidence le lien entre la précision de l'ébauche et la quantité d'observations à apporter au système pour

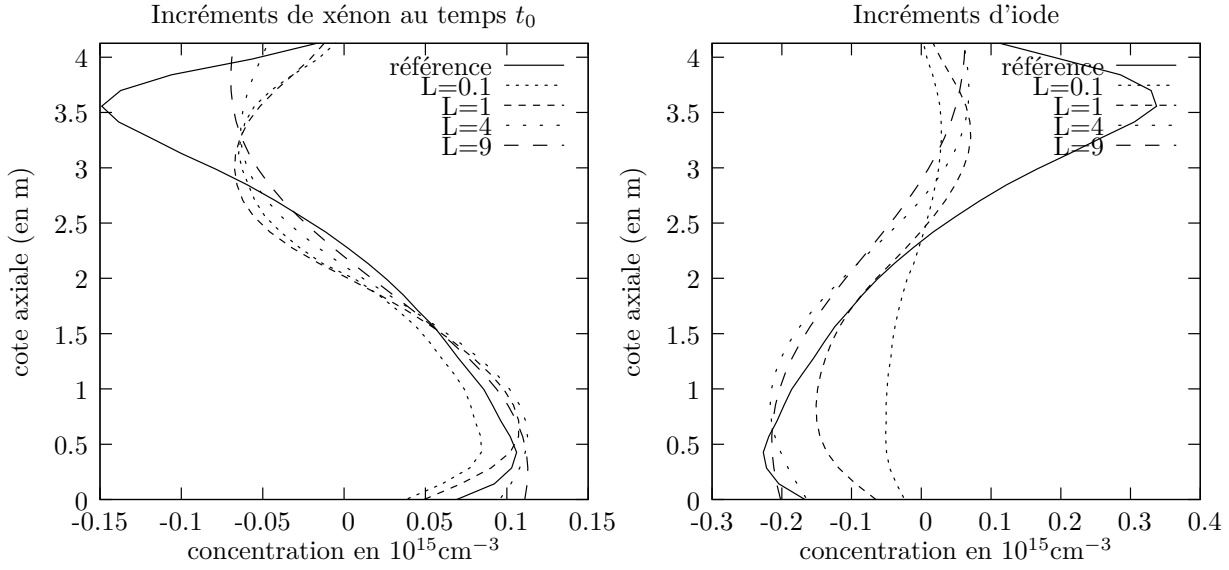


FIG. 6.27. Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps initial t_0 en fonction de l'échelle de corrélation L retenue pour la construction de la matrice \mathbf{B} . La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8×8 mesures (8 temps d'observation) sont assimilées.

améliorer significativement la qualité de l'analyse. On prend comme critère de qualité, la somme des variances des erreurs d'analyse qui correspond à la trace de la matrice de covariance d'erreur d'analyse. Cette matrice de covariance, notée \mathbf{P}^a , est égale à l'inverse de la matrice hessienne de la fonction coût \mathcal{J}_{4DVAR} calculée au point d'analyse \mathbf{X}^a (voir section 2.4) :

$$\mathbf{P}^a = (\nabla^2 \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}^a))^{-1}.$$

On rappelle que la matrice hessienne au point \mathbf{X} est donnée par l'expression suivante :

$$\nabla^2 \mathcal{J}_{4DVAR}(\mathbf{X}) = \mathbf{B}^{-1} + \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})^T \mathbf{R}_i^{-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}})$$

où les matrices $\mathbf{H}_{|\mathbf{X}}$ et $\mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}}$ sont les linéaires tangents au point \mathbf{X} des opérateurs d'observation \mathcal{H} et de dynamique $\mathcal{M}_{i,0}$ entre les instants t_0 et t_i . Dans les résultats présentés, on approche les linéaires tangents au point \mathbf{X}^a par les linéaires tangents au point d'ébauche \mathbf{X}^b .

On donne dans la figure 6.29 l'évolution du rapport $tr(\mathbf{P}^a)/tr(\mathbf{B})$ en fonction du nombre de séries d'observation et pour différents écarts-types σ_B ayant servi à la construction de la matrice \mathbf{B} . Le transitoire calculé par le modèle \mathcal{M} est celui utilisé tout au long de ce chapitre et décrit en 6.1.3. La taille de la fenêtre d'assimilation n'est plus en revanche de 3 heures mais de 18 heures et la fréquence des observations est au maximum de 3 heures. Le niveau d'incertitude mis sur les observations est également donné en 6.1.3.

On remarque tout d'abord que la prise en compte d'un nombre de plus en plus grand d'observations permet de réduire la variance des erreurs d'analyse. On distingue cependant un palier dans la diminution du rapport $tr(\mathbf{P}^a)/tr(\mathbf{B})$ qui apparaît plus ou moins vite selon la précision de l'ébauche. D'autre part, on constate que le gain apporté par les observations est nettement

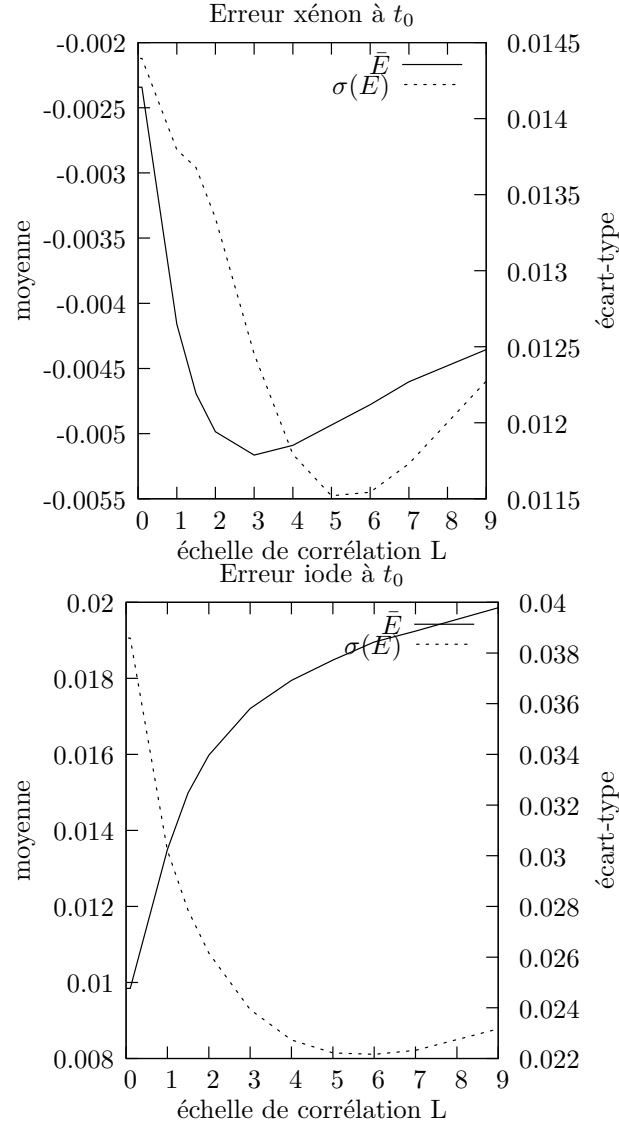


FIG. 6.28. Moyenne et écart-type des erreurs spatiales sur le xénon et l'iode au temps initial, en fonction de l'échelle de corrélation L retenue pour la construction de la matrice \mathbf{B} . La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8×8 mesures (8 temps d'observation) sont assimilées.

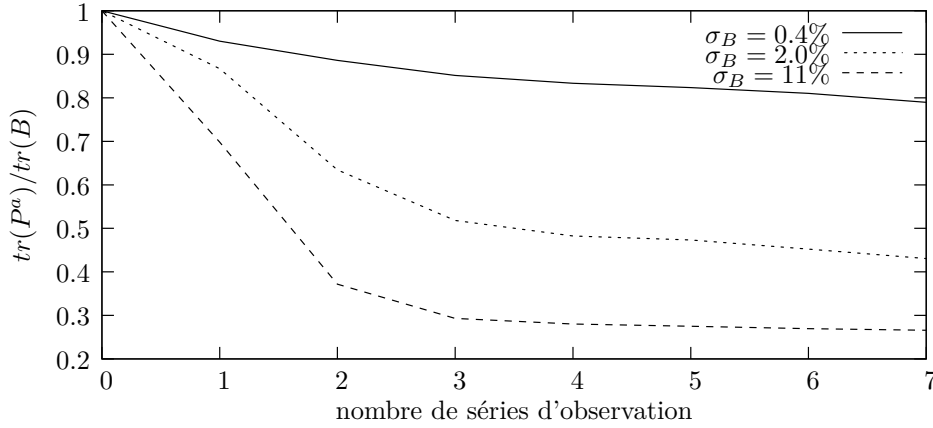


FIG. 6.29. Rapport $\text{tr}(\mathbf{P}^a)/\text{tr}(\mathbf{B})$ en fonction du nombre de séries d'observation et pour différents écarts-types σ_B ayant servi à la construction de la matrice \mathbf{B} . Le transitoire calculé par le modèle \mathcal{M} est décrit en 6.1.3. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 18 heures et la fréquence des observations est au maximum de 3 heures.

plus important lorsque l'ébauche est de qualité moyenne que lorsqu'elle est de bonne qualité.

Dans les expériences présentées dans les chapitres suivants, l'ébauche n'est pas très précise. On en déduit à partir des résultats présentés ici qu'on devrait améliorer significativement la connaissance de la dynamique avec relativement peu d'observations (d'après la figure 6.29, 3 temps d'observation devraient suffire). On montre cependant dans ces chapitres que pour affiner la connaissance des concentrations xénon et iode au temps initial, beaucoup plus d'observations sont en fait nécessaires.

6.5 Synthèse

Dans ce chapitre, on a cherché à **identifier les caractéristiques de la dynamique couplée xénon/iode** et à comprendre le fonctionnement de l'assimilation appliquée à cette dynamique. On rappelle qu'on cherche à améliorer la connaissance des concentrations initiales 1D de xénon et d'iode (en tout 60 scalaires) à partir de l'**assimilation** à différents temps d'observation, **de 6 mesures axiales de puissance intégrée, d'1 mesure de l'axial offset de puissance et d'1 mesure de la concentration en bore**.

On a tout d'abord montré qu'il existait des **transitoires convergents et divergents**, c'est-à-dire des transitoires pour lesquels une perturbation sur l'état initial s'amortit dans le temps et d'autres pour lesquels cette perturbation s'amplifie. On a identifié l'irradiation du combustible comme étant un des facteurs de cette convergence ou divergence. On a ensuite mis en évidence l'importance des périodes de demi-vie du xénon (environ 9 heures) et de l'iode (environ 6 heures et demi) dans le processus d'analyse. On a en effet montré que la dynamique xénon/iode possède une mémoire limitée dans le temps reliée aux constantes de décroissance du xénon et de l'iode. Cet élément permet d'en conclure qu'il n'est **pas nécessaire d'allonger indéfiniment la taille de la fenêtre d'assimilation** pour améliorer l'analyse. On a rappelé que, puisque l'iode n'intervient pas dans l'opérateur d'observation (modèle stationnaire de CIREP1D), **il n'est pas possible de contrôler l'iode avec un schéma 3DVAR**.

Dans un second temps, on s'est intéressé aux différents rôles joués par les observations dans le processus d'analyse. Pour ce faire, on a utilisé des mesures exactes et on a supprimé le terme d'ébauche pour isoler correctement l'influence des observations sur la qualité de l'analyse produite. La perte d'information liée au passage d'un vecteur de 30 mesures axiales de puissance à un vecteur de 6 mesures de puissance intégrée se traduit par une sur ou sous-estimation des extrema des incréments d'analyse. Les mesures de l'axial offset de puissance et de bore permettent d'améliorer la qualité de l'analyse en présence d'erreurs de mesure.

On a ensuite montré l'importance d'un terme d'ébauche lorsque les mesures sont entachées d'erreur. On a justifié l'introduction de corrélations spatiales dans la matrice \mathbf{B} pour améliorer la qualité de l'analyse. L'échelle de corrélation a été fixée en fonction de critère de qualité et de réduction du coût de l'assimilation.

Enfin, on s'est intéressé au poids de l'ébauche et des observations dans le processus d'analyse. On a montré une amélioration puis une dégradation de la qualité de l'analyse au fur et à mesure qu'on diminuait le poids de l'ébauche dans l'analyse. Ceci implique la **recherche du bon accord entre information de type ébauche et information de type mesure** lors de l'établissement du schéma d'assimilation.

On dispose à présent de toutes les informations nécessaires pour l'établissement des schémas d'assimilation des deux chapitres suivants.

Estimation des concentrations initiales dans le cadre de la perte du KIT

Le KIT est une application qui centralise en continu les mesures provenant de différents capteurs positionnés dans la tranche mais elle ne fait pas partie de l'instrumentation de sécurité [Del94]. Il arrive que cette application tombe en panne (ce qu'on surnomme la perte du KIT) et donc que les données fournies par le KIT soient manquantes ou tout à fait fausses pendant toute la durée de la panne.

Un outil d'aide au pilotage, nommé SimuN1D, est en cours de déploiement dans les centrales [Rou07a]. Il permet de simuler des transitoires de puissance en 1D en s'appuyant sur les données fournies par le KIT. Pendant la perte du KIT, le code SimuN1D produit une simulation erronée. Lors de la reprise du KIT, la simulation reste erronée pendant un temps incertain puisque la dynamique a une mémoire des champs physiques calculés aux pas de temps précédents. Actuellement il est envisagé de retirer le réacteur du suivi de charge pendant cette perte du KIT ainsi que, pendant un intervalle de temps fixé à une trentaine d'heures après la reprise du KIT, dans le but de retrouver une simulation proche de la réalité. Le recalage au moment de la reprise du KIT des champs physiques de la dynamique permettrait de retrouver plus rapidement une simulation proche de la réalité et donc de rendre le réacteur plus rapidement disponible pour le suivi de charge.

On propose dans ce chapitre de mettre en place un schéma d'assimilation 4DVAR pour une expérience se rapprochant de ce type de problématique. On simule sur une période d'environ trois jours, un transitoire où le KIT produit des données (faiblement) erronées au bout de trois heures et pendant environ un jour et demi. On recalcule les concentrations 1D de xénon et d'iode au temps de la reprise du KIT en assimilant des observations de type concentration en bore et puissance intégrée sur plusieurs mailles. On montre que quelques heures d'assimilation sont suffisantes pour retrouver la dynamique réelle du xénon.

7.1 Énoncé du problème

7.1.1 Contexte

Un outil d'aide au pilotage :

Une bonne maîtrise du pilotage permet d'optimiser la disponibilité et la performance de production du parc. Cette maîtrise du pilotage s'appuie naturellement sur la simulation numérique. Un outil d'aide au pilotage nommé SimuN1D est en cours de déploiement dans les centrales [Rou07a][Rou07b]. Il permet de simuler le comportement neutronique d'un réacteur dans le cadre d'une modélisation 1D. Concrètement, il s'agit d'une interface graphique au code LIBELLULE qui est le code de neutronique 1D d'EDF [Fio00]. SimuN1D a pour principale fonction de faciliter la mise en œuvre de simulations de transitoires neutroniques quasi statiques (transitoires résolus par une suite de calculs stationnaires). Ces simulations de transitoire incluent le calcul de transitoires xénon sur la base d'un enchaînement de calculs statiques 1D avec la résolution des équations temporelles du xénon et de l'iode. L'objectif est de répondre rapidement aux besoins d'élaboration de stratégies de pilotage des réacteurs optimales en terme de marges par rapport aux critères de sûreté et en tenant compte des contraintes d'exploitation des tranches.

Les données d'entrée de cet outil peuvent être fournies de différentes façons. L'une d'entre elles correspond à la soumission des données expérimentales collectées par le calculateur de tranche KIT.

Le calculateur de tranche KIT :

Comme nous l'avons déjà dit en introduction, le calculateur de tranche KIT est une application qui centralise en continu diverses informations issues de capteurs positionnés dans la tranche. Cette application ne fait pas partie de l'instrumentation de sécurité. Elle vise [Del94] :

- à apporter une aide à la conduite de la tranche,
- à effectuer le traitement des relevés de mesures de flux,
- à permettre une analyse *a posteriori* du fonctionnement et des incidents de la tranche grâce à un archivage sur disque des informations des trois derniers jours de fonctionnement.

Les données KIT sont réputées imprécises et il arrive que, pendant une certaine plage de temps, des données KIT soient manquantes ou erronées du fait d'une panne de l'application. La qualité des données KIT va être de plus en plus primordiale avec le développement d'applications utilisant ces données en entrée. Ainsi, des travaux en cours visent à améliorer la qualité de ces données à l'aide de techniques du traitement du signal [Pei04].

La perte des données KIT consécutivement à une panne pose bien entendu un problème pour un outil d'aide au pilotage en ligne car ce dernier ne peut plus alors fournir une simulation numérique fiable.

Perte du KIT et suivi de la tranche :

Pendant la perte du KIT, l'outil de pilotage produit une simulation erronée qui se poursuit bien au-delà de la fin de la panne de l'application puisque la dynamique a une mémoire des champs physiques calculés aux pas de temps précédents. Actuellement, il est envisagé de retirer le réacteur du suivi de charge pendant tout l'intervalle de temps où la simulation numérique est jugée non fiable (intervalle estimé à une trentaine d'heures). Pourtant, le recalage des champs physiques de la dynamique au moment de la reprise du KIT permettrait de retrouver plus rapidement une simulation numérique proche de la réalité et donc de rendre le réacteur plus

rapidement disponible pour le suivi de charge. On développe dans la suite la faisabilité d’une telle solution.

7.1.2 Dispositif expérimental

On propose de mettre en place une expérience simulant la perte du KIT. Cette expérience porte sur un intervalle d’un peu plus de trois jours (80 heures). On construit deux transitoires très proches l’un de l’autre, l’un servant de référence et l’autre servant à construire des concentrations d’ébauche. Pendant la première demi-heure, on simule un suivi de charge. Les consignes de puissance et d’insertion des grappes pour les simulations de référence et d’ébauche sont identiques pendant cette demi-heure. Au bout d’une trentaine de minutes, la perte du KIT se traduit par la perte d’une nouvelle consigne d’insertion de grappes pour le transitoire ébauche : la profondeur d’insertion des grappes devrait passer de 65.7 cm à 7.7 cm dans le cœur, pendant toute la durée de la perte du KIT. Au moment de la reprise des données exactes du KIT (à la 23ème heure environ), les consignes de puissance et d’insertion des grappes pour le transitoire ébauche sont à nouveau identiques à celles du transitoire de référence. Les caractéristiques de ces deux transitoires sont résumées dans le tableau 7.1.

Insertion des grappes (en cm)		
temps en hh:mm:ss (en sec)	transitoire de référence	transitoire ébauche
00:00:00 (0)	0.	0
00:00:30 (30)	35.7	35.7
00:01:00 (60)	65.7	65.7
00:32:00 (1920)	65.7	65.7
perte du KIT		
00:33:30 (2010)	7.7	65.7
reprise du KIT		
23:08:00 (83280)	7.7	7.7
80:00:00 (288000)	7.7	7.7

TAB. 7.1. *Consignes d’insertion de grappes pour les transitoires de référence et d’ébauche. Elles ne diffèrent que pendant la perte du KIT entre $t=2010$ et $t=83280$ secondes. La puissance est maintenue à 3040 MW pendant toute la durée de l’expérience.*

Les simulations sont conduites avec le profil 1D d’irradiation représenté dans la figure 7.1. Celui-ci prend en compte les grilles de maintien du combustible. Les concentrations 1D de xénon et d’iode calculées avec ce profil sont donc en “dents de scie” (visibles sur la figure 7.2). Enfin, les deux transitoires sont initialisés par les concentrations xénon et iode à l’équilibre.

On présente maintenant les résultats obtenus pour ces deux transitoires décrits précédemment. Les figures 7.2 et 7.3 montrent l’évolution des concentrations axiales de xénon et d’iode au cours du temps. Dans le cas du transitoire de référence, l’insertion un peu moins profonde des grappes au cours de la simulation occasionne une plus forte oscillation axiale au cours du temps. Cette amplification de l’amplitude de l’oscillation est plus visible dans la figure 7.4 qui représente l’axial offset de xénon en fonction du temps pour les deux simulations.

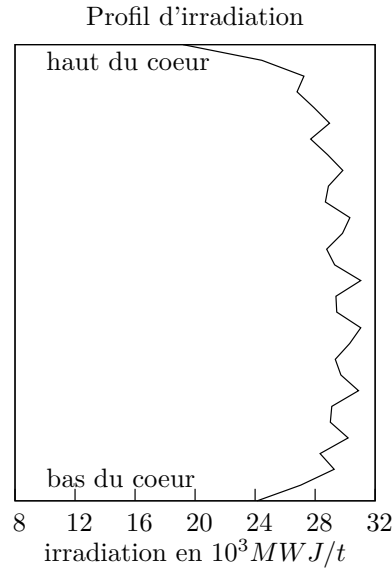


FIG. 7.1. Profil 1D d'irradiation utilisé pour l'expérience (réacteur en milieu de vie). Ce profil tient compte des grilles de maintien du combustible.

Concentration axiale 1D de xénon (en 10^{15}cm^{-3}) Concentration axiale 1D d'iode (en 10^{15}cm^{-3})

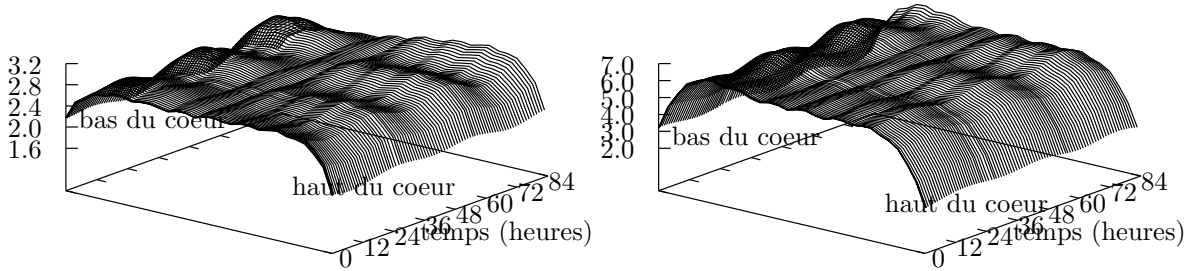


FIG. 7.2. Simulation avec CIREP1D du transitoire de référence. Les pas de temps sont de 30 secondes entre l'instant initial et la 2010ème seconde; ils sont de 120 secondes entre $t = 2010$ et $t = 2250$ secondes, de 250 secondes entre $t = 2250$ et $t = 78780$ secondes puis de 900 secondes jusqu'à la fin de la simulation.

Concentration axiale 1D de xénon (en 10^{15}cm^{-3}) Concentration axiale 1D d'iode (en 10^{15}cm^{-3})

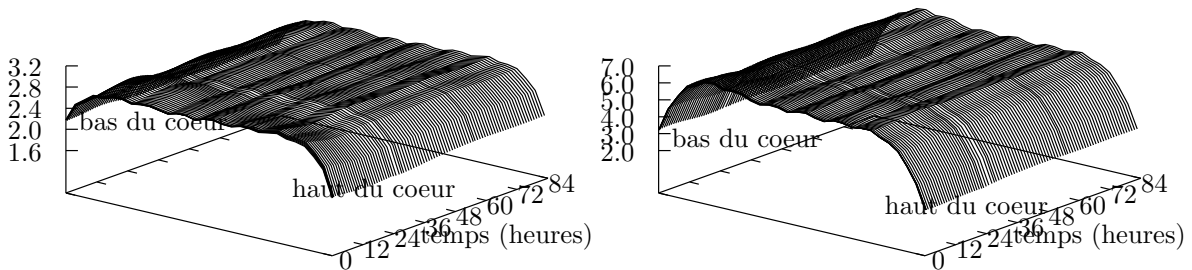


FIG. 7.3. Simulation avec CIREP1D du transitoire d'ébauche. Les pas de temps sont identiques à ceux du transitoire de référence.

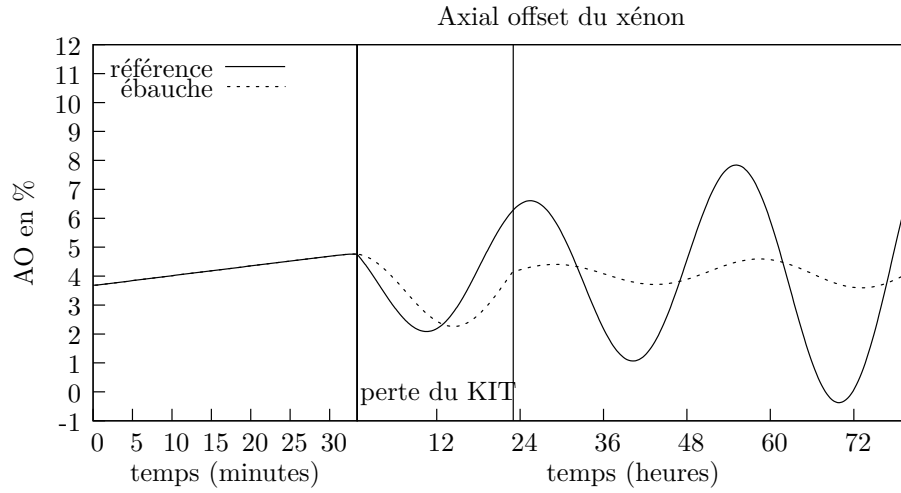


FIG. 7.4. Axial offset de xénon au cours du temps. Dans le cas du transitoire ébauche, les oscillations sont de plus grande amplitude mais semblent être de même fréquence que celles du transitoire de référence.

On termine en présentant les concentrations en bore critique calculées pour les deux transitoires (figure 7.5). Au moment de la perte des données KIT ($t = 2010$ secondes), on impose dans le transitoire de référence une extraction des grappes qui se traduit par une légère augmentation de la concentration en bore (environ 3 ppm) qu'on ne voit pas dans le transitoire ébauche puisque celui-ci ne prend pas en compte ce dernier mouvement des grappes. Au moment de la reprise des données KIT ($t = 83280$ secondes), il y a une discontinuité nette dans la courbe de concentration en bore critique pour le transitoire ébauche.

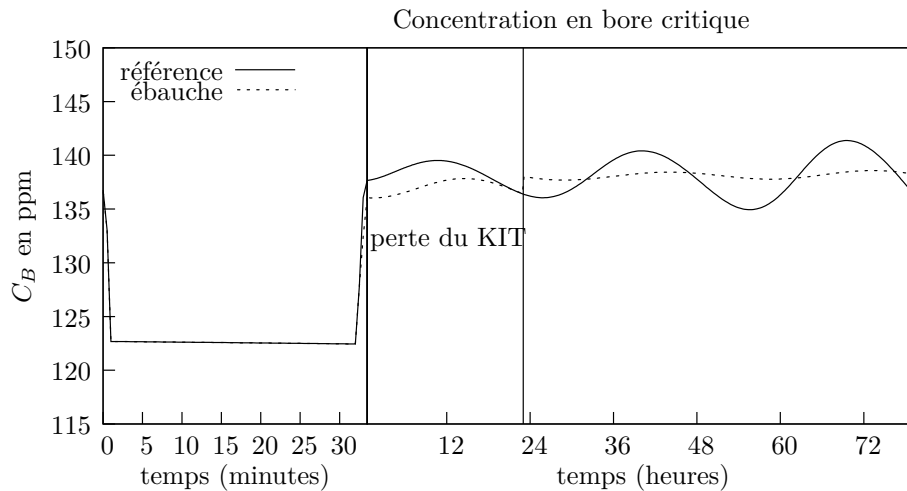


FIG. 7.5. Évolution de la concentration en bore nécessaire pour rendre critique le cœur. Au moment de la reprise des données exactes du KIT, on observe un saut dans la concentration en bore pour le transitoire ébauche.

Amélioration visée

On a représenté dans la figure 7.6 les écarts relatifs à $t = 40h$ (moment de la reprise) entre les concentrations de xénon et d'iode des deux transitoires. L'écart sur les concentrations de xénon atteint un maximum de 5% dans la moitié inférieure du cœur mais est quasi nulle dans la partie médiane du cœur : l'oscillation axiale est de plus faible amplitude dans le transitoire ébauche que dans le transitoire de référence. Le maximum de l'écart sur les concentrations d'iode est plus faible (de l'ordre de 2.5%) mais toujours du même signe : dans le transitoire ébauche, on surévalue la concentration d'iode et donc le niveau du réservoir d'iode.

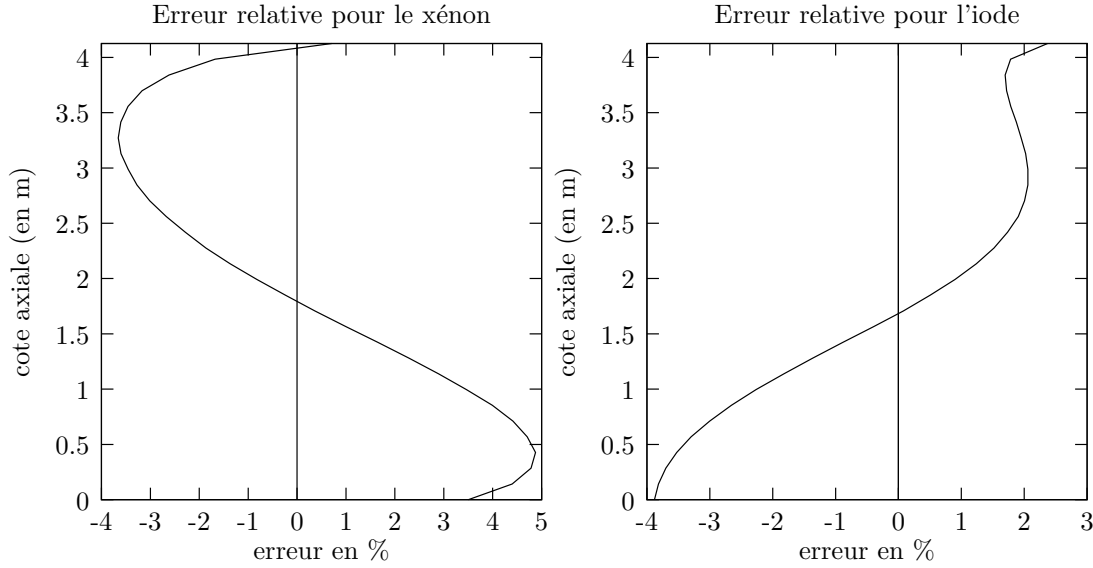


FIG. 7.6. Écarts relatifs $100 \times \frac{\mathbf{X}^{ref}(i) - \mathbf{X}^b(i)}{\mathbf{X}^{ref}(i)}$ dans chaque maille i sur les concentrations xénon et iode à $t = 40$ heures.

Cet écart de prévision sur la concentration xénon va d'abord augmenter au cours du temps pour ensuite rediminuer (figure 7.7) : sans mouvement des grappes et sans variation de la puissance totale, le xénon et l'iode atteignent leur valeur à l'équilibre au bout de quelques jours et les simulations des deux transitoires finissent par redonner les mêmes résultats. Cet équilibre est en théorie atteint en 1 jour ou 2. Les présentes simulations montrent un temps plus long. On peut penser que la description du transitoire est peut-être un peu trop éloignée de la réalité (mouvement des grappes non suffisamment en adéquation avec les variations de puissance) et qu'on introduit donc une perturbation qui met plus de temps à se résorber. Une autre explication sur l'allongement de la durée nécessaire au retour à l'équilibre peut être donnée par un défaut de représentativité de l'empoisonnement global du cœur par les produits de fission. En ayant des périodes de décroissance radioactive très variables, les produits de fission stabilisent en effet le cœur. Or, seul l'empoisonnement par le xénon est pris en compte dans le code CIREP1D¹³. On peut supposer que l'amortissement des oscillations est plus rapide avec la prise en compte de plus de produits de fission.

¹³On recense environ huit cents produits de fission mais seule une dizaine représentent les trois quarts de l'empoisonnement. En pratique, on en modélise moins d'une dizaine. Dans le code de référence COCCINELLE par exemple, seuls le xénon, et le samarium sont pris en compte.

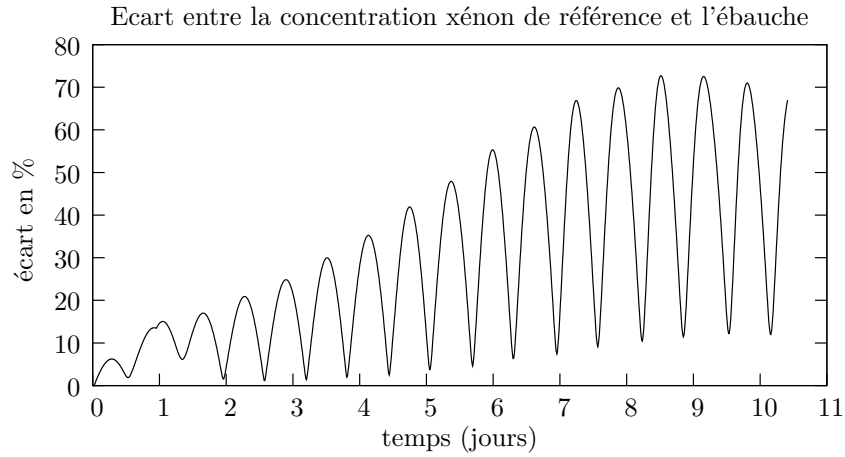


FIG. 7.7. Écart $\|C_{Xe}^{ref} - C_{Xe}^b\|_2$ en norme euclidienne entre la concentration xénon calculée dans le cadre de référence C_{Xe}^{ref} et celle calculée dans le cadre ébauche C_{Xe}^b . Dans cette simulation, l'écart s'amplifie jusqu'au 9ème jour pour ensuite rediminuer.

En résumé, si on laisse le réacteur dans le même état pendant suffisamment longtemps, l'erreur de prévision due à des données d'entrée erronées dans un temps passé tend à se résorber d'elle-même. Un outil d'aide au pilotage comme SimuN1D peut donc être recalé “naturellement” en figeant les consignes de puissance. Cette approche présente cependant l'inconvénient de retirer la tranche du suivi de réseau. On va montrer dans la suite qu'en assimilant des données de puissance et de bore, il est possible de recalibrer un outil d'aide au pilotage en réduisant le délai d'indisponibilité de la tranche pour le suivi de réseau.

7.1.3 Rappel du schéma d'assimilation

On propose de recalibrer les concentrations de xénon et d'iode au temps de la reprise des données KIT en assimilant des données de puissance et de concentrations en bore critique. Le temps initial de l'expérience d'assimilation est donc fixé à $t_0 = 83280$ secondes (temps de la reprise du KIT).

Observation :

Les observations sont composées de

- 6 mesures de puissance dégagée dans le combustible, intégrées sur plusieurs mailles (indice p),
- 1 mesure de l'axial offset de puissance (indice AO),
- 1 mesure de la concentration en bore (indice b).

Ces mesures sont obtenues dans le cadre des expériences jumelles en considérant

- 30% d'erreur sur les mesures de puissance intégrée (les chambres externes fournissent une information relativement grossière),
- 10% d'erreur sur la mesure du déséquilibre axial,
- 1% d'erreur sur la mesure de la concentration en bore.

La matrice de covariance d'erreur d'observation \mathbf{R} de taille 8×8 est construite selon l'expression 4.3 à partir de ces pourcentages d'erreur.

Ébauche :

L'ébauche est construite selon le mode opératoire décrit plus haut. Elle contient les valeurs des concentrations xénon et iode aux nœuds du maillage 1D utilisé dans CIREP1D. Le vecteur d'ébauche est donc de taille $n = 60$.

La matrice de covariance d'ébauche \mathbf{B} est diagonale par bloc (un bloc pour chacune des deux espèces). L'échelle de corrélation est fixée à $L = 4$. L'écart-type σ_B servant à la construction de \mathbf{B} est basé sur l'écart entre les concentrations de référence et d'ébauche au temps initial et est d'environ 3%.

Fenêtre d'assimilation :

La taille de la fenêtre d'assimilation est variable mais la fenêtre débute toujours à $t_0 = 83280$ secondes (temps de la reprise du KIT). Dans la suite, le temps initial fait donc référence au temps de la reprise du KIT.

Incréments d'analyse :

On rappelle que les incréments sont définis à partir du vecteur d'ébauche. L'incrément vrai de xénon δC_{Xe}^t est défini comme la différence entre la concentration vraie de xénon C_{Xe}^t et la concentration ébauche de xénon C_{Xe}^b :

$$\delta C_{Xe}^t = C_{Xe}^t - C_{Xe}^b.$$

De la même manière, l'incrément d'analyse d'iode δC_I^a est défini comme la différence entre la concentration analysée d'iode C_I^t et la concentration ébauche d'iode C_I^b :

$$\delta C_I^a = C_I^t - C_I^b.$$

7.2 Contrôle du xénon

7.2.1 Assimilation d'un unique ensemble d'observation au temps initial (schéma 3DVAR)

On propose d'étudier, dans un premier temps, un schéma d'assimilation de type 3DVAR. Le schéma 3DVAR présente l'avantage d'être peu coûteux du point de vue du temps calcul puisqu'il ne requiert pas le calcul de la dynamique du xénon et de l'iode. En revanche, il ne permet pas de contrôler la variable d'iode puisque celle-ci n'intervient pas dans l'opérateur d'observation qui correspond à un calcul avec CIREP1D en stationnaire (recherche de bore critique à concentration xénon imposée). La concentration d'iode au temps initial (temps de la reprise du KIT) reste donc après analyse identique à la concentration d'ébauche. On montre cependant que ce schéma fournit des résultats très encourageants.

Qualité des champs observables :

On présente dans la figure 7.8 le profil 1D de la puissance dégagée dans le combustible au temps initial t_0 de l'expérience d'assimilation. On constate qu'une seule série d'observation au temps initial permet de corriger le champ de puissance ébauche à ce même temps de manière satisfaisante.

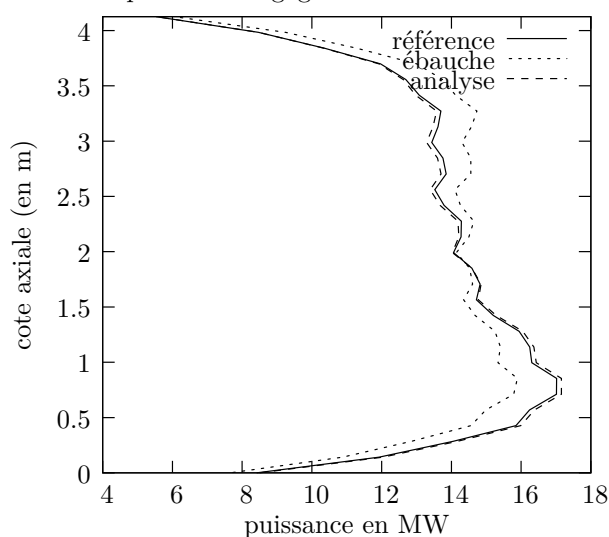
Profil 1D de puissance dégagée dans le combustible au temps t_0 

FIG. 7.8. Profil 1D de puissance calculé à partir de l'incrément d'analyse de xénon. On donne pour comparaison les profils 1D de puissance de référence et d'ébauche. L'incrément d'analyse de xénon est obtenu avec un schéma 3DVAR avec assimilation au temps initial t_0 de 6 mesures de puissance intégrée axialement, 1 mesure d'axial offset de puissance et 1 mesure de concentration en bore critique.

On s'intéresse à présent à la qualité de la prévision en étudiant les champs de puissance et de concentration en bore calculés avec l'état analysé de xénon au temps initial. Dans la figure 7.9, on compare aux valeurs de référence et d'ébauche, l'évolution temporelle de l'axial offset de puissance (donné en %) et la concentration en bore critique obtenus après réajustement de la concentration initiale de xénon. Par rapport aux champs obtenus avec l'état d'ébauche, on observe une nette amélioration de la prise en compte générale de la dynamique : après analyse, on obtient à 1% près environ l'amplitude des oscillations de l'axial offset et à 1 ppm près l'amplitude des oscillations de la concentration en bore critique. La phase des oscillations est également améliorée : on passe d'un déphasage de 4 heures à un déphasage d'environ 1 heure seulement par rapport à l'oscillation de référence.

Qualité de l'incrément d'analyse du xénon :

On présente dans la figure 7.10 l'incrément vrai de xénon et l'incrément d'analyse obtenu par le schéma 3DVAR. On note que dans la partie médiane du cœur l'incrément de xénon est correctement estimé. Dans la moitié inférieure du cœur, le maximum de l'incrément de xénon est sous-estimé mais il est cependant bien localisé. En revanche l'incrément vrai de xénon est moins bien approché dans la partie supérieure du cœur : le maximum n'est pas situé à la bonne cote axiale et la concentration xénon dans les deux dernières mailles est mal évaluée.

Limitation du schéma 3DVAR :

Bien que la prévision de l'axial offset de puissance soit de bonne qualité (figure 7.9), la prévision du profil 1D de puissance est décevante. On représente dans la figure 7.11 le profil 1D de puissance 6 heures après l'étape d'analyse. Par rapport à la figure 7.8, où le profil de puissance au temps initial après analyse est très proche du profil de référence, on observe une

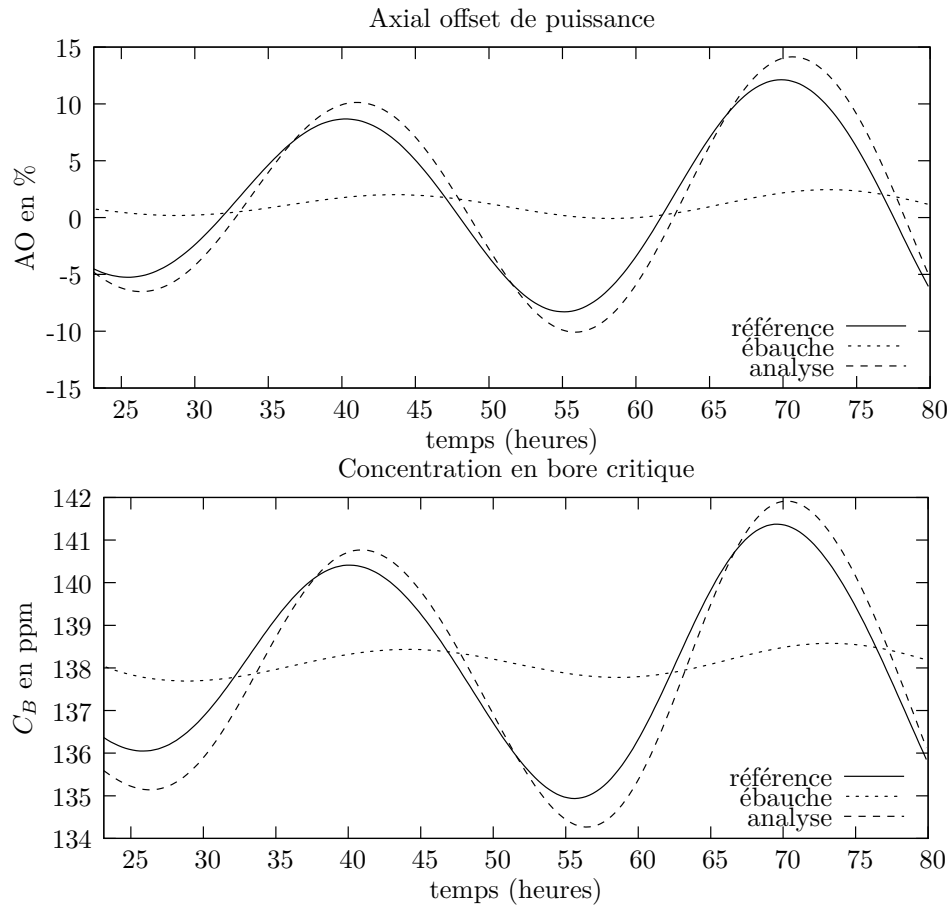


FIG. 7.9. Axial offset de puissance et des concentrations en bore critique pour l'état de référence, l'ébauche et l'état analysé. L'analyse est obtenue avec un schéma 3DVAR avec assimilation au temps initial t_0 de 6 mesures de puissance intégrée axialement, 1 mesure d'axial offset de puissance et 1 mesure de concentration en bore.

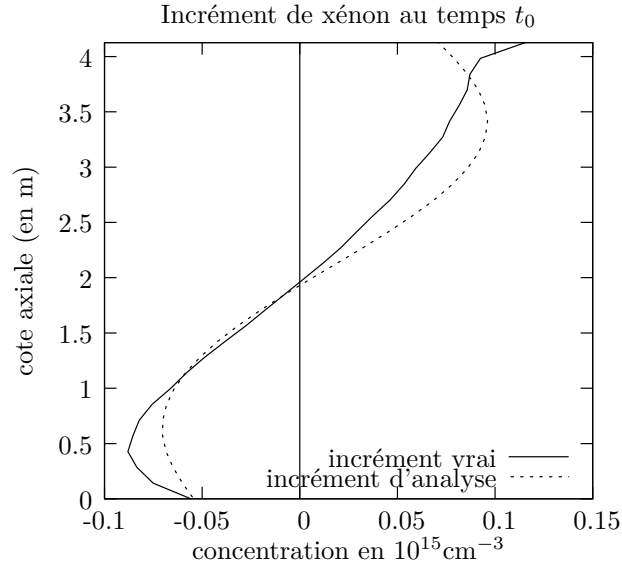


FIG. 7.10. Au temps t_0 , incrément vrai et incrément d'analyse de xénon obtenu avec le schéma 3DVAR où sont assimilés au temps t_0 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure d'axial offset de puissance et 1 mesure de concentration en bore.

dégradation importante de la qualité du profil analysé qui ne semble pas meilleure que celle du profil d'ébauche. Afin d'améliorer ce point, on étudie dans le paragraphe suivant un schéma 4DVAR (mais toujours sans contrôle de l'iode).

7.2.2 Prise en compte de la dynamique (schéma 4DVAR)

On considère à présent un schéma d'assimilation de type 4DVAR faisant intervenir la dynamique du système étudié. On ne cherche toujours pas à contrôler la variable iode.

Influence de la taille de la fenêtre

Dans un premier temps, on cherche à déterminer l'influence de la taille de la fenêtre d'assimilation. On met en place différentes expériences d'assimilation comportant deux temps d'observation, le second temps étant fixé successivement à 1 heure, 3 heures, 6 heures, 9 heures et 18 heures après le premier temps t_0 . La meilleure analyse est obtenue avec des fenêtres d'assimilation situées entre 3 et 6 heures. Dans la figure 7.12, on compare l'axial offset de puissance de référence à l'axial offset prédit par le schéma 3DVAR décrit précédemment et à l'axial offset prédit par le schéma 4DVAR avec une taille de fenêtre de 6 heures. On constate que la prise en compte de la dynamique via le schéma 4DVAR permet de corriger encore un peu plus l'amplitude de l'oscillation de l'axial offset prédit. Il demeure toujours cependant, un léger décalage de phase. Enfin, le profil de puissance analysé à $t_0 + 6$ heure est de bien meilleure qualité que celui prédit par le schéma 3DVAR. (figure 7.13).

Si on regarde la qualité de l'incrément d'analyse de xénon, elle n'est pas aussi satisfaisante. Dans la figure 7.14, on constate que l'incrément d'analyse de xénon obtenu avec le schéma 4DVAR est de moins bonne qualité que celui obtenu avec le schéma 3DVAR. Puisque la concentration initiale en iode n'est pas contrôlée, l'erreur de prévision due à une mauvaise estimation de cette concentration ne peut être corrigée que par l'intermédiaire de la concentration initiale de xénon.

Profil 1D de puissance dégagée dans le combustible au temps $t_0 + 6h$

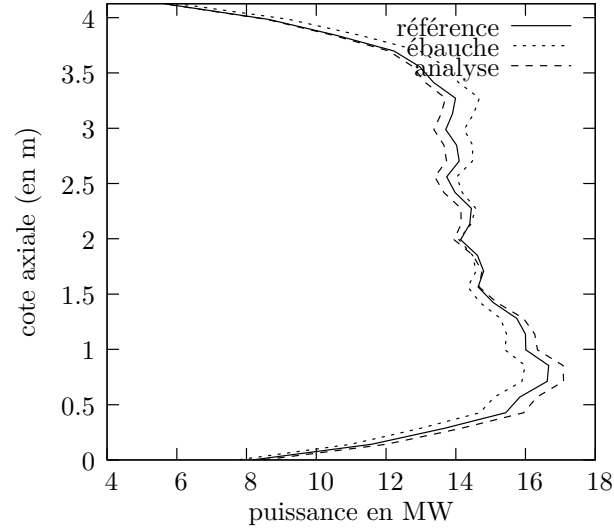


FIG. 7.11. Profil 1D de puissance prédit à $t_0 + 6$ heures après réajustement de la concentration initiale de xénon à l'aide du schéma 3DVAR.

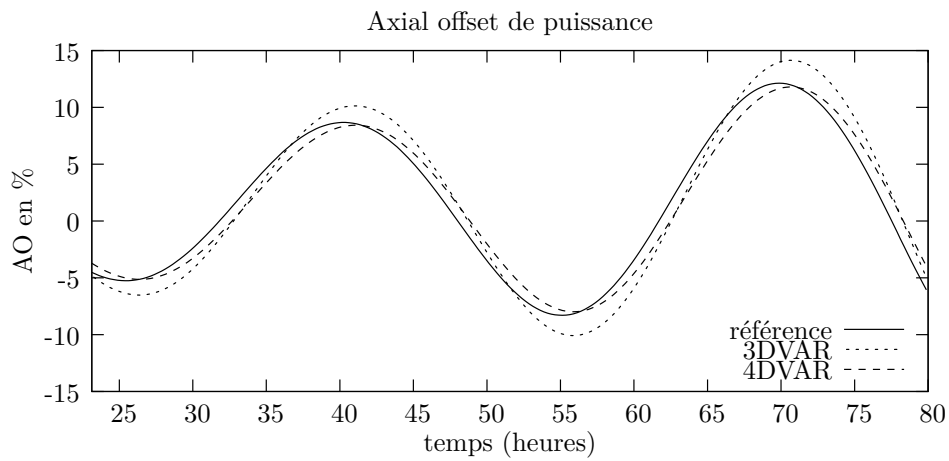
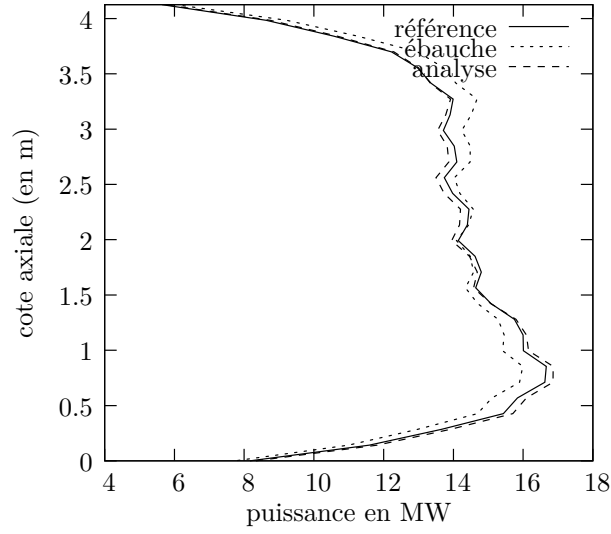


FIG. 7.12. Axial offset de puissance prédit par les schémas 3DVAR et 4DVAR comparés à l'axial offset de référence. L'axial offset prédit à l'aide du schéma 4DVAR correspond dans cette figure à l'assimilation d'observations aux temps t_0 et $t_0 + 6h$.

Profil 1D de puissance dégagée dans le combustible au temps $t_0 + 6h$ FIG. 7.13. Profil 1D de puissance prédit à $t_0 + 6$ heures après réajustement de la concentration initiale de xénon à l'aide du schéma 4DVAR (fenêtre de 6 heures et 2 temps d'observation).

L'incrément d'analyse de xénon est donc calculé en tenant compte à la fois de l'erreur initiale sur le xénon et de celle sur l'iode : il n'y a donc aucune chance de se rapprocher de l'incrément vrai de xénon. En résumé, un schéma d'assimilation ne prenant pas en compte l'iode permet d'améliorer la simulation de la dynamique *dans* la fenêtre d'assimilation mais la qualité de la prévision reste tout à fait aléatoire. On vérifie dans le paragraphe suivant que le défaut de qualité de l'analyse n'est pas relié ici à un manque d'observations.

Influence du nombre de temps d'observation

Bien entendu, l'augmentation du nombre d'observations permet de diminuer *dans* la fenêtre d'assimilation, l'erreur sur les champs observés. On présente dans la figure 7.15 l'erreur relative en norme euclidienne sur le champ de puissance 1D au cours du temps pour 2 et 4 temps d'observation. On donne pour référence l'erreur commise dans le cas du schéma 3DVAR. L'expérience d'assimilation est basée sur une fenêtre de 3 heures. On observe une diminution de l'erreur dans la fenêtre d'assimilation, en doublant le nombre de temps d'observation. Dans la fenêtre de prévision, il n'est pas possible de dire lequel des deux schémas 4DVAR minimise l'erreur sur le champ 1D de puissance. On parvient à la même conclusion que dans le paragraphe précédent, à savoir qu'en l'absence de contrôle de la variable iode, il n'est pas possible d'assurer une amélioration de la prévision de l'état du cœur : il est seulement possible d'améliorer la simulation *dans* la fenêtre d'assimilation en tenant compte de plus d'informations sur le système.

On donne dans la figure 7.16 les incréments d'analyse calculés avec un schéma 3DVAR et les deux schémas 4DVAR avec respectivement 2 et 4 temps d'observation. L'incrément calculé avec le schéma 3DVAR se distingue des deux autres incréments qui sont relativement proches, mais il est difficile d'établir lequel des trois incréments d'analyse est le plus proche de l'incrément vrai.

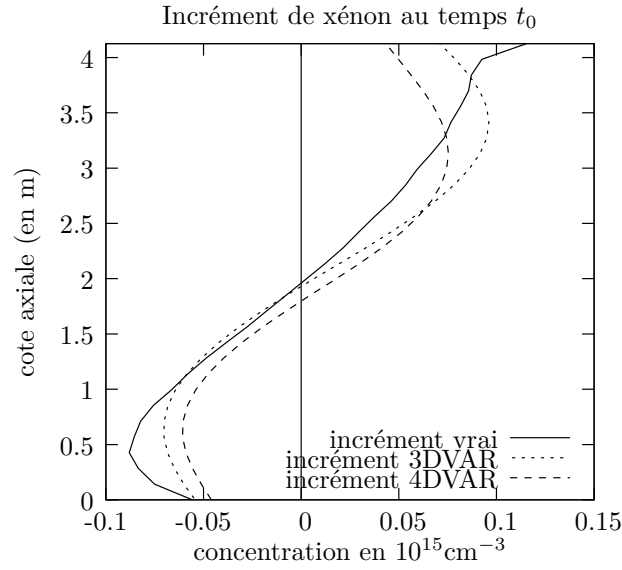


FIG. 7.14. *Incrément vrai et incrément d'analyse de xénon au temps initial t_0 obtenus d'une part avec le schéma 3DVAR et d'autre part avec le schéma 4DVAR et où les deux temps d'observation sont séparés de 6 heures.*

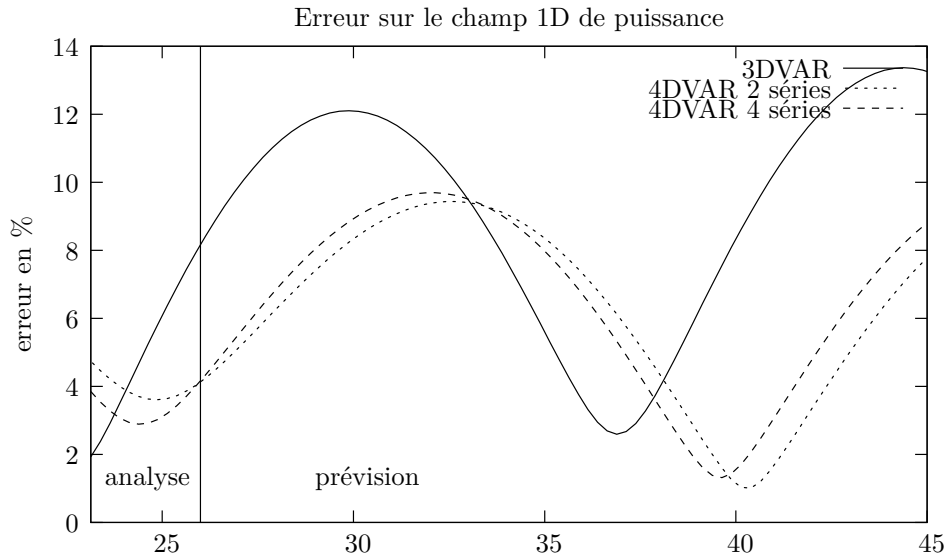


FIG. 7.15. *Erreur relative calculée en norme euclidienne sur le profil 1D de puissance calculé après réajustement de la concentration initiale de xénon à l'aide d'un schéma 3DVAR et deux schémas 4DVAR. Les schémas 4DVAR sont basés sur une fenêtre de 3 heures (délimitée par une barre verticale dans la figure) et on a étudié un premier cas avec 2 temps d'observation et un second cas avec 4 temps d'observation. On peut comparer ces résultats avec ceux des schémas 4DVAR où le xénon et l'iode sont contrôlés et pour lesquels on observe une réduction de l'erreur par exemple de 3% à la trentième heure (figure 7.21).*

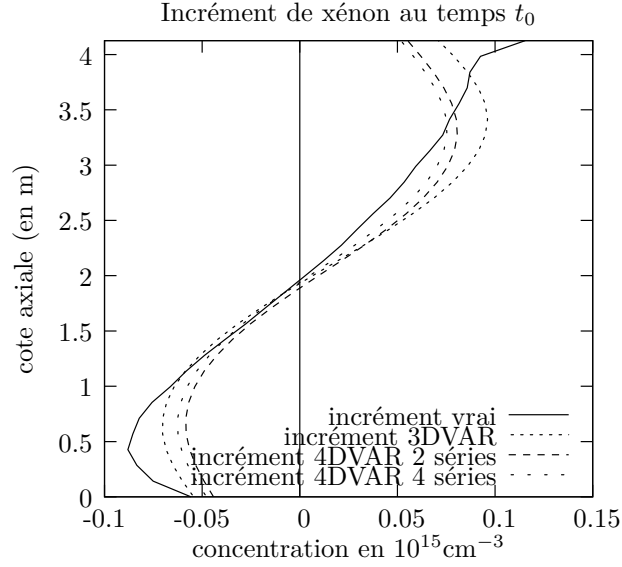


FIG. 7.16. Incrément vrai et incréments d'analyse de xénon au temps initial t_0 obtenus d'une part avec le schéma 3DVAR et d'autre part avec deux schémas 4DVAR avec respectivement 2 et 4 temps d'observation. La taille de la fenêtre des schémas 4DVAR est de 3 heures.

En résumé

Pour améliorer la connaissance de l'état du cœur à un instant t , le contrôle de la variable xénon à travers un schéma 3DVAR donne des résultats positifs. Mais si on souhaite améliorer la prévision de l'état du cœur, il est préférable d'introduire de la dynamique dans le schéma variationnel (schéma 4DVAR). La qualité de la prévision est cependant d'une durée limitée : la variable iode ne pouvant être corrigée, le réajustement de la variable xénon doit compenser dans la fenêtre d'assimilation la mauvaise évaluation du niveau d'iode. L'incrément d'analyse de xénon s'éloigne donc de l'incrément vrai et cela conduit à long terme à une mauvaise représentation de la dynamique du cœur.

Avec de tels schémas où l'iode n'est pas contrôlé, on ne peut donc assurer que l'amélioration de l'estimation des champs observés et ce, dans la fenêtre d'assimilation. Cette amélioration est fonction de la fréquence des observations. En revanche, l'augmentation de la taille de la fenêtre ne correspond pas nécessairement à une amélioration de la simulation : il est préférable de considérer des tailles proches des temps caractéristiques de la dynamique xénon/iode, c'est-à-dire entre 3 et 9 heures.

7.3 Contrôle du xénon et de l'iode en expérience 4DVAR

Pour améliorer les résultats précédents, on propose donc de contrôler l'iode en plus du xénon dans le cadre d'un schéma 4DVAR. Il s'agit de déterminer le nombre d'observation ainsi que la longueur de la fenêtre d'assimilation représentant le meilleur rapport qualité/coût de calcul.

Assimilation de deux séries d'observation sur 15 minutes

On s'intéresse tout d'abord à l'expérience suivante : on considère une fenêtre d'assimilation d'une taille de 15 minutes et on observe au temps initial t_0 de la fenêtre et au temps final $t_0 + 15$ minutes 1 série d'observation (soit 2×8 mesures assimilées).

On donne dans la figure 7.17 l'incrément d'analyse et l'incrément vrai de xénon et d'iode. L'incrément d'analyse 4DVAR de xénon approche un peu moins bien l'incrément vrai par rapport à celui du 3DVAR (extrema un peu plus sous-estimés). Quant à l'incrément d'analyse d'iode, il est quasi nul : la fenêtre d'assimilation est trop petite de sorte que la variable iode ne peut pas vraiment être contrôlée. Pourtant, si on compare l'erreur sur la puissance combustible analysée obtenue d'une part avec contrôle de l'iode et d'autre part sans contrôle de l'iode (figure 7.18), on constate que la très légère amélioration de l'estimation de l'iode au temps initial permet de diminuer de 1 % l'amplitude de l'erreur sur la puissance au cours du temps.

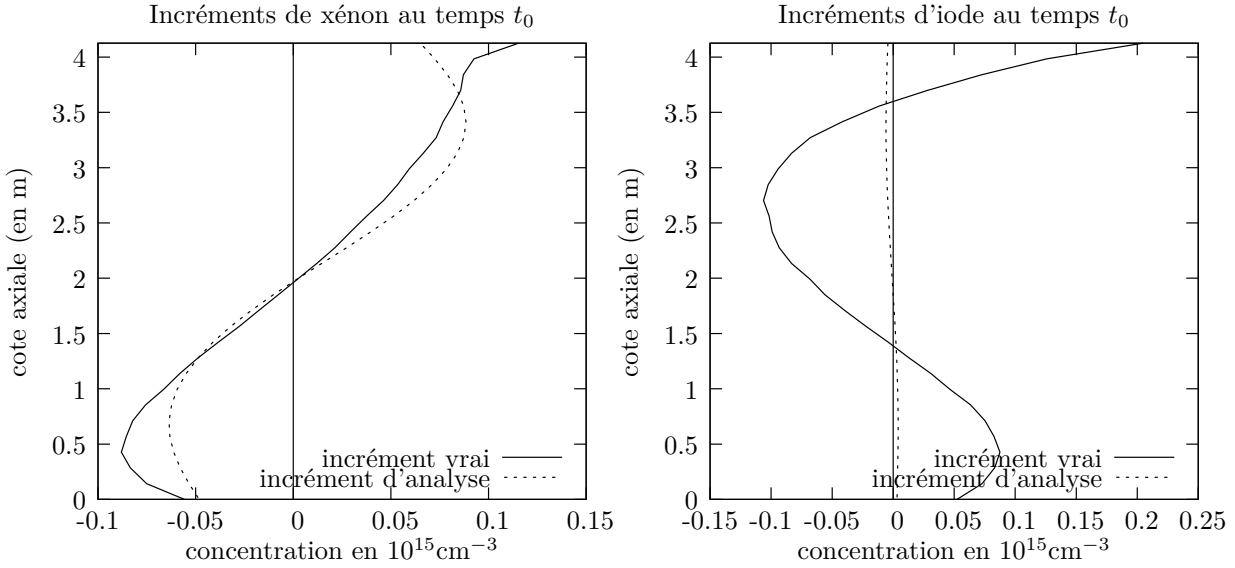


FIG. 7.17. Incréments d'analyse de xénon et d'iode en 4DVAR. La fenêtre d'assimilation est de 15 minutes. A t_0 et à $t_0 + 15$ minutes, on observe 6 mesures de puissance intégrée, une mesure d'axial offset de puissance et une mesure de concentration en bore.

Détermination de la taille optimale de la fenêtre d'assimilation

On vient de voir que prendre en compte la dynamique sur un intervalle de 15 minutes permet d'améliorer très légèrement la prévision des champs 1D de puissance. On recherche la taille optimale de la fenêtre d'assimilation. On ne prend en compte que deux temps d'observation. Différents incréments d'analyse obtenus avec les tailles de 1 heure, 6 heures, et 18 heures sont donnés dans la figure 7.19. On constate que l'incrément de xénon est moins sensible à l'augmentation de la taille de la fenêtre d'assimilation que l'incrément d'iode. Compte-tenu de la ressemblance des différents incréments de xénon obtenus, il est difficile d'estimer quelle taille permet d'obtenir le meilleur incrément d'analyse de xénon. En revanche, il semble qu'avec une fenêtre de 6 heures, on obtient le meilleur incrément d'iode. Cette taille est à rapprocher du temps caractéristique de la décroissance radioactive de l'iode (voir chapitre 6) : il paraît normal qu'il soit difficile de contrôler une variable à un instant t en tenant compte de mesures obtenues

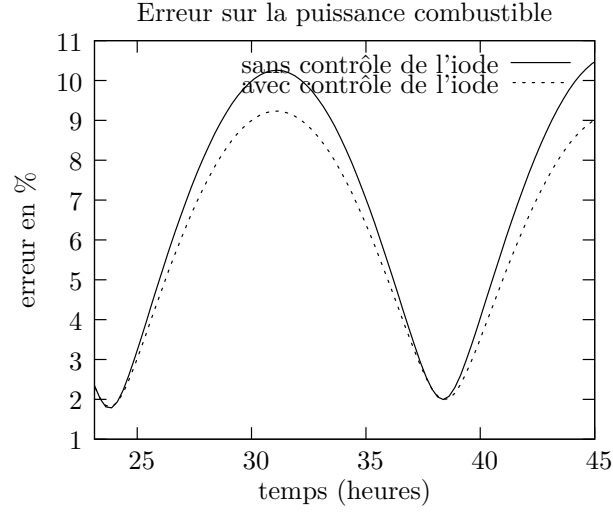


FIG. 7.18. Erreur en norme euclidienne sur le champ 1D de puissance au cours du temps avec ou sans contrôle de l'iode. Le schéma d'assimilation est un schéma 4DVAR où la taille de la fenêtre d'assimilation est de 15 minutes.

bien après la période de demi-vie de cette variable. Cette taille de 6 heures correspond également aux meilleures prévisions obtenues pour les champs de puissance 1D et de concentrations de bore.

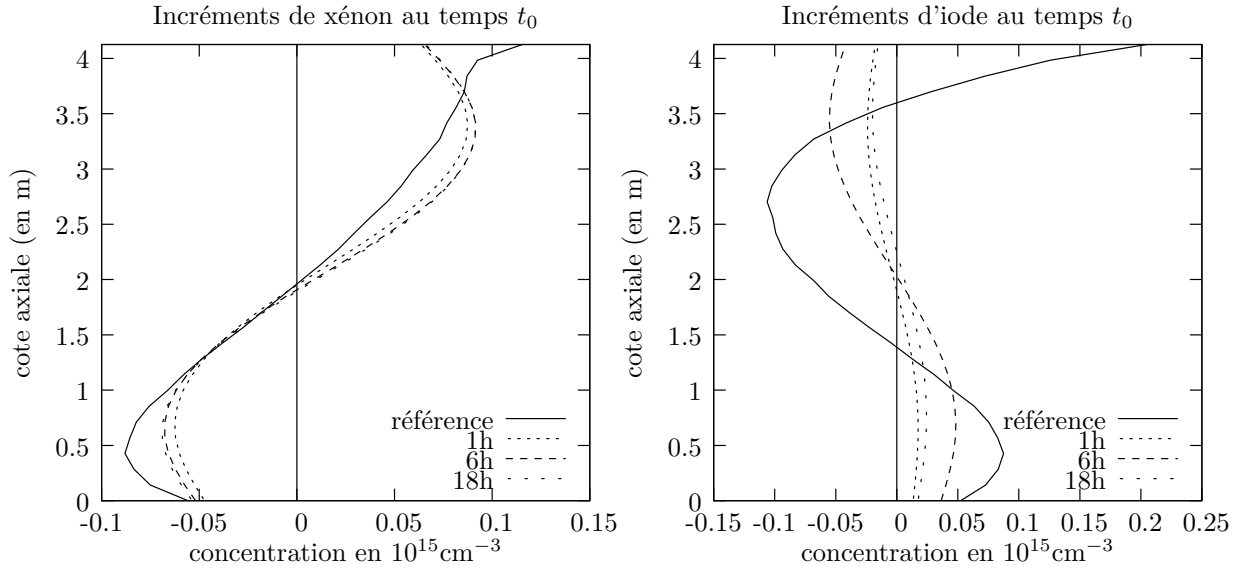


FIG. 7.19. Incréments d'analyse de xénon et d'iode selon la taille de la fenêtre d'assimilation. Le schéma d'assimilation est un schéma 4DVAR comportant deux séries de mesures (au début et à la fin de la fenêtre).

Détermination du nombre optimal de temps d'observation

L'augmentation de la taille de la fenêtre d'assimilation permet d'augmenter la qualité de l'incrément d'analyse d'iode, l'incrément de xénon y étant peu sensible. On propose d'étudier à présent l'impact du nombre des observations sur la qualité des incréments de xénon et d'iode. On mène deux études : la première consiste à augmenter la fréquence d'observation de mesures **exactes** sur une fenêtre de 3 heures, tandis que la seconde consiste à augmenter la fréquence d'observation de mesures bruitées sur une fenêtre de 6 heures.

Comme précédemment, on constate que c'est le champ 1D d'iode qui est le plus sensible à la variation du nombre des observations. On donne dans la figure 7.20 les incréments d'analyse de xénon et d'iode pour des expériences avec 2, 8 et 9 temps d'observation dans la fenêtre de 6 heures. La première expérience constitue un système sous-déterminé en observations (moins d'observations que de paramètres à recalcr) tandis que la seconde correspond à un système d'assimilation déterminé et la dernière à un système sur-déterminé. L'incrément d'analyse de xénon varie très peu en fonction de ce nombre de temps d'observation. En revanche, la qualité de l'incrément d'analyse d'iode s'améliore beaucoup dans la partie supérieure du cœur au fur et à mesure qu'on augmente le nombre d'observations assimilées. Si on regarde à présent la qualité des champs observables dans la fenêtre d'assimilation, on observe une diminution de l'erreur sur le champ 1D de puissance en augmentant le nombre de temps d'observation (figure 7.21).

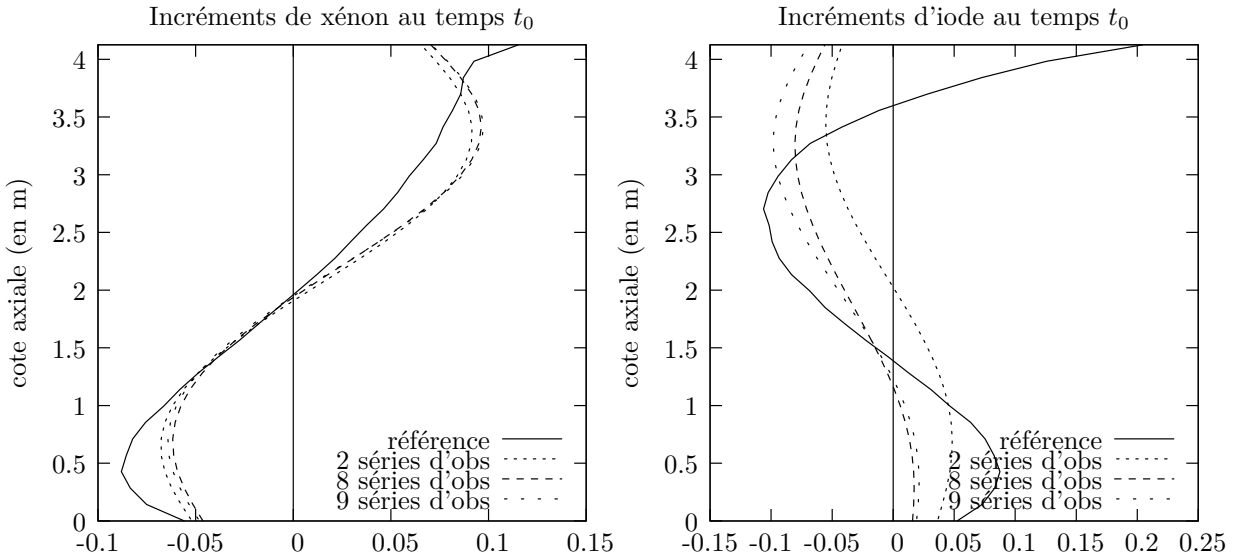


FIG. 7.20. Incréments d'analyse de xénon et d'iode selon le nombre d'observations assimilées. Le schéma d'assimilation est un schéma 4DVAR où la taille de la fenêtre d'assimilation est de 6 heures.

7.4 Et si la qualité de l'ébauche baissait ?

Dans les expériences menées dans ce chapitre, l'ébauche est de qualité moyenne : l'écart-type de l'erreur d'ébauche se situe autour de 10%. Que se passe-t-il lorsque le niveau de confiance dans l'ébauche baisse ? On sait déjà que le coût en temps de calcul de la minimisation est plus élevé puisque le conditionnement de la matrice hessienne de la fonction coût \mathcal{J} se détériore lorsque l'écart-type de l'erreur d'ébauche augmente (chapitre 5). Intuitivement, on devine que le système d'assimilation devient plus sensible aux informations apportées par les observations.

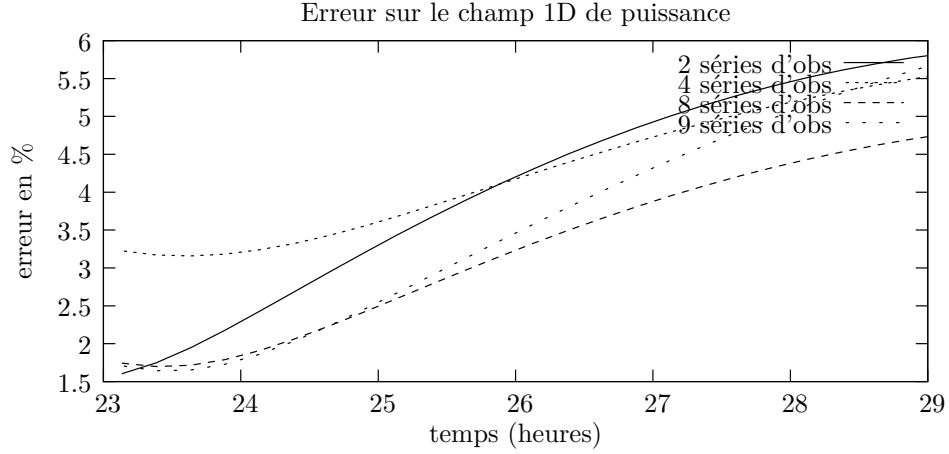


FIG. 7.21. Erreur en norme euclidienne sur le champ 1D de puissance au cours du temps avec ou sans contrôle de l'iode. Le schéma d'assimilation est un schéma 4DVAR où la taille de la fenêtre d'assimilation est de 6 heures.

En gardant la même ébauche \mathbf{X}^b que dans les expériences précédentes, on étudie dans la figure 7.22 l'impact, dans la qualité des incréments d'analyse, d'une diminution de la confiance dans l'ébauche : on réalise 3 calculs où on fait varier la valeur de l'écart-type

1. $\sigma_{Bxe} = 3\%$ pour le xénon et $\sigma_{Bi} = 2\%$ pour l'iode (écarts-types identiques aux études présentées précédemment dans ce chapitre),
2. $\sigma_{Bxe} = 7\%$ et $\sigma_{Bi} = 4\%$,
3. $\sigma_{Bxe} = \sigma_{Bi} = 30\%$.

La matrice de covariance d'erreur d'observation \mathbf{R} reste inchangée. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 4 séries de mesure sont assimilées. Avec une incertitude de 30% sur l'ébauche, les incréments deviennent beaucoup plus sensibles aux informations de type mesure. Lorsqu'elles sont d'assez bonne qualité comme la mesure de l'axial offset de puissance, on peut observer, comme dans la figure 7.23, une amélioration de la prévision pour le champ observé. Mais lorsqu'elles sont de piètre qualité comme les mesures de puissance intégrée (30% d'erreur), elles ne suffisent pas à renseigner sur la distribution axiale de puissance. Dans le cas où l'ébauche est jugée moins fiable que les observations (cas $\sigma_B = 30\%$), on observe alors une dégradation de la qualité de l'analyse (figure 7.22). La conclusion de cette expérience est qu'il faut essayer dans la mesure du possible d'avoir une ébauche de bonne qualité. Cela se traduit par le recalage en continu de la dynamique xénon et pas uniquement à l'occasion d'une perte des données KIT.

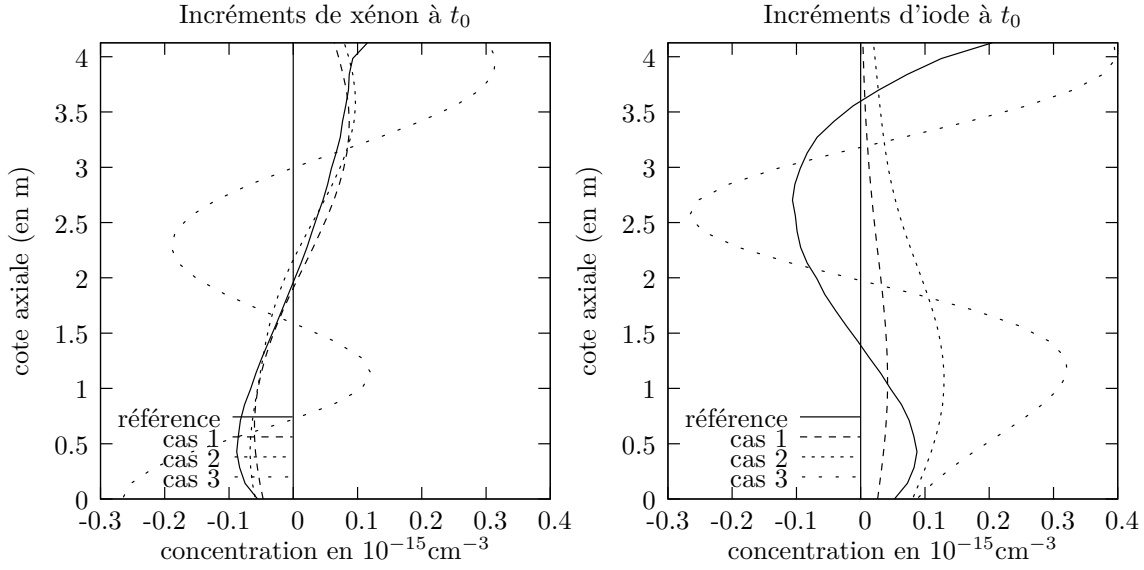


FIG. 7.22. Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 . La fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 4 séries de mesure sont assimilées. Le cas 1 correspond à une matrice \mathbf{B} construite à partir des écarts-types suivants : $\sigma_{B_{xe}} = 3\%$ pour le xénon et $\sigma_{B_i} = 2\%$ pour l'iode. Les écarts-types du cas 2 sont $\sigma_{B_{xe}} = 7\%$ et $\sigma_{B_i} = 4\%$. Et enfin les écarts-types σ_B du cas 3 sont fixés à 30%.

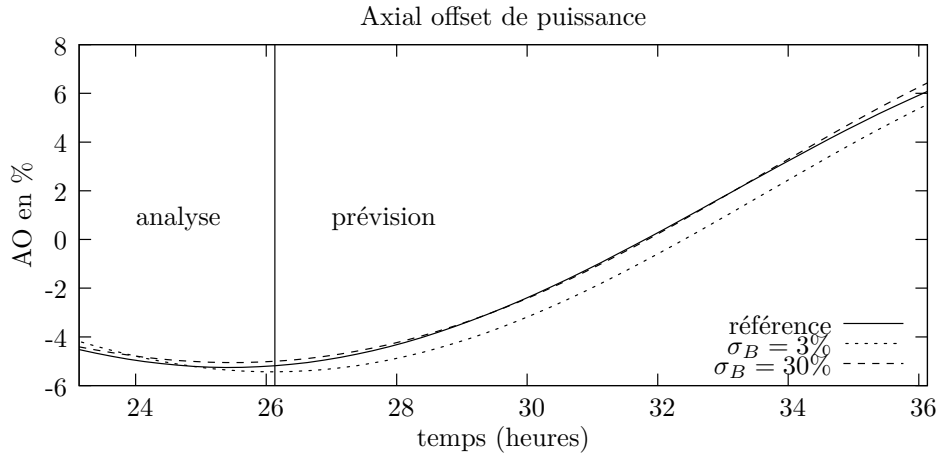


FIG. 7.23. Axial offset de puissance de référence et d'analyse calculés avec les écarts-types $\sigma_{B_{xe}} = 3\%$ et $\sigma_{B_i} = 2\%$ (cas 1) et $\sigma_B = 30\%$ (cas 2). La fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 4 séries de mesure sont assimilées.

7.5 Synthèse

Dans ce chapitre, on s'est intéressé à la problématique du **recalage d'un outil d'aide au pilotage après une perte des données KIT**. L'objectif des expériences menées était de montrer qu'il était possible grâce à l'assimilation de données, de **retrouver une bonne approximation de l'état du cœur** après une perte des données KIT et ce, **dans un intervalle de temps inférieur à la trentaine d'heures** qui correspond à la mémoire du système physique.

On a proposé plusieurs schémas d'assimilation pour la reconstitution de l'état de la dynamique xénon. Ces schémas ont été construits dans le cadre des **expériences jumelles** où les mesures sont obtenues par calcul. Les données assimilées étaient les mêmes que celles des chapitres précédents : 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure d'axial offset de puissance et 1 mesure de la concentration en bore. Le bruit de type gaussien introduit dans ces mesures était respectivement de 30%, 10% et 1%. Enfin, l'ébauche utilisée était de qualité correcte (l'erreur maximale d'ébauche est de 3%).

On a montré qu'il était possible avec un **schéma 3DVAR** (où la dynamique n'est donc pas prise en compte et où seul le xénon est contrôlé) de produire une photo convenable de l'état du cœur à l'instant de l'assimilation. Ce schéma présente l'avantage d'être peu coûteux en terme de temps de calcul puisqu'il ne nécessite pas l'évaluation de la dynamique xénon ; il requiert seulement l'évaluation du modèle stationnaire lors de l'utilisation de l'opérateur d'observation \mathcal{H} qui correspond à un calcul de bore critique à concentration xénon imposée. Il est donc intéressant dans le cas où on souhaite effectuer un premier **bilan de l'état du cœur** (estimation de l'axial offset xénon par exemple) au moment de la reprise des données KIT. Ce schéma n'offre cependant pas de résultats convenables du point de vue de la prévision puisque l'iode n'est pas corrigé.

Pour obtenir une **prévision** convenable, il est nécessaire d'utiliser un **schéma d'assimilation de type 4DVAR** qui permet de prendre en compte la dynamique du système et donc de contrôler à la fois le xénon et l'iode. Les paramètres à régler pour ce schéma 4DVAR sont la taille de la fenêtre d'assimilation ainsi que la fréquence des observations dans cette fenêtre. Ces paramètres ont surtout une influence sur l'incrément d'analyse d'iode : en effet la concentration xénon initiale est relativement bien recalée avec seulement 2 temps d'observation répartis dans une fenêtre de 3 heures. Il est donc difficile d'améliorer significativement l'incrément d'analyse de xénon avec plus d'observations et plus de dynamique prise en compte. Par contre, l'incrément d'analyse d'iode s'améliore nettement lorsqu'on augmente la fréquence des observations. Il faut cependant veiller à prendre une fenêtre d'assimilation dont la taille n'excède pas les temps caractéristiques du xénon et de l'iode : on peut dire qu'au-delà de 9 heures, la qualité des incréments se dégradent.

Le résultat important de cette étude est donc qu'il est possible de retrouver une **estimation convenable de l'état de la dynamique xénon/iode à l'instant de la reprise du KIT en assimilant trois séries d'observation espacées de 2 heures** (fenêtre de 6 heures). Il n'est alors pas nécessaire d'attendre le retour à une position stable du cœur (c'est-à-dire un délai d'une trentaine d'heures) pour pouvoir reprendre le suivi en ligne. Cela permet donc de **réduire de 24 heures le délai d'indisponibilité du réacteur** pour le suivi de charge.

On a étudié par ailleurs l'effet de la dégradation de la confiance dans l'ébauche sur la qualité de l'analyse en augmentant l'incertitude sur l'ébauche de 3% à 30%. La confiance baissant dans l'ébauche, l'analyse devient plus sensible aux informations de type mesure qu'à l'ébauche. Or sans (ou presque sans) terme d'ébauche, la mauvaise qualité des mesures de puissance intégrée

empêche de retrouver un profil 1D convenable de concentrations xénon et iode. On propose donc dans le chapitre suivant un recalage continu (et non plus seulement lors de la perte des données KIT) de la dynamique xénon/iode afin de disposer d'une ébauche de qualité convenable.

Vers la mise en place d'un outil de recalage en ligne

Dans le chapitre précédent, on a montré l'utilité de l'assimilation de données pour estimer l'état de la dynamique après une perte de données. On a vu que les résultats étaient très satisfaisants si l'ébauche était de qualité correcte. Or il est difficile de garantir cette qualité, voire même de l'estimer. D'autre part, il peut être utile de pouvoir faire une photographie du cœur à tout instant : pour estimer l'axial offset de xénon par exemple lors d'une reprise de charge ou pour effectuer des bilans. Le recalage en continu d'un outil d'aide au pilotage devrait donc constituer une réponse à ces différents éléments.

On propose dans ce chapitre quelques résultats préliminaires dans cette voie. On construit deux chaînes d'assimilation variationnelle sur une période totale de 24 heures. Alors que la première chaîne dispose d'un modèle parfait, on étudie avec la seconde, les effets d'un modèle imparfait. Dans ces expériences, il n'y a pas de mise à jour de la matrice d'ébauche à chaque nouvelle étape d'analyse, ni de prise en compte d'erreur modèle dans la deuxième chaîne. Dans une perspective d'industrialisation, on explore, d'autre part, la possibilité de réduire le coût de l'assimilation en réduisant la taille de l'espace de contrôle.

8.1 Énoncé du problème

On a présenté dans le chapitre précédent l'outil d'aide au pilotage SimuN1D. Cet outil, relié au calculateur de tranche KIT, permet d'établir des stratégies de pilotage du cœur en simulant en 1D la dynamique présente et future du cœur. On propose dans ce chapitre d'étudier la mise en place d'une chaîne d'assimilation sur un intervalle de 24 heures pour un tel outil. Les données assimilées sont les mêmes que dans le chapitre précédent.

Transitoire simulé : On construit un transitoire représentant un suivi de charge sur 24 heures : on répète en fait une séquence de forçage de 2 heures 40 (9600 secondes) décrite dans le tableau 8.1, où alternent variations de puissance et d'insertion des grappes. Le pas utilisé pour le schéma en temps est de 600 secondes (10 minutes). Le temps initial de la simulation est $t_0 = 0$.

temps en hh:mm (en sec)		Puissance (en MW)	Insertion des grappes (en cm)
00:00	(0)	3040	22.7
00:40	(2400)	3035	35.7
01:20	(4800)	3000	65.7
02:00	(7200)	3010	65.7
02:40	(9600)	3050	7.741

TAB. 8.1. Consignes de puissance et d'insertion de grappes du transitoire simulé.

Référence et ébauche : Comme dans les précédents chapitres, les expériences d'assimilation sont menées dans le cadre des expériences jumelles mais on se donne cette fois un modèle parfait et un modèle imparfait. On rappelle qu'une des données d'entrée du code CIREP1D est une nappe 1D d'irradiation qui caractérise le taux d'usure du combustible. En prenant deux nappes d'irradiation, on obtient en quelque sorte deux modèles pour simuler la dynamique couplée du xénon et de l'iode. Ainsi dans ce chapitre, les simulations sont conduites avec deux nappes d'irradiation : celle présentée dans le chapitre précédent permet de disposer d'un modèle de référence (appelé modèle parfait) tandis qu'une seconde nappe (voir figure 8.1), légèrement différente de la première, permet d'avoir un modèle approché du premier (appelé modèle imparfait).

La trajectoire de référence est présentée dans la figure 8.2 ; elle est calculée avec la nappe d'irradiation de référence. Dans les transitoires précédemment étudiés, la puissance et les grappes étaient maintenues à un niveau constant après une plus ou moins longue période de suivi de charge ; on voyait alors se développer une belle oscillation xénon sinusoïdale (par exemple figure 7.12, 182). Ici la variation continue de la puissance et de l'insertion des grappes superpose une autre oscillation à la première oscillation (voir figure 8.3).

Les deux trajectoires ébauches (une obtenue avec le modèle parfait et une autre obtenue avec le modèle imparfait) sont calculées à partir des mêmes concentrations ébauches de xénon et d'iode au temps initial. La représentation 3D de ces trajectoires ressemble assez fortement à celle de la trajectoire de référence donnée dans la figure 8.2. On donne, dans la figure 8.4, l'écart entre les concentrations d'ébauche et les concentrations de référence. On constate qu'au temps initial, on a choisi une ébauche dont la qualité n'est pas homogène axialement : on observe un écart assez fort dans le premier tiers du cœur qui atteint un maximum d'environ -14% dans la première maille ; dans les deux autres tiers, l'écart est en moyenne de 2%. Au cours du temps, cet

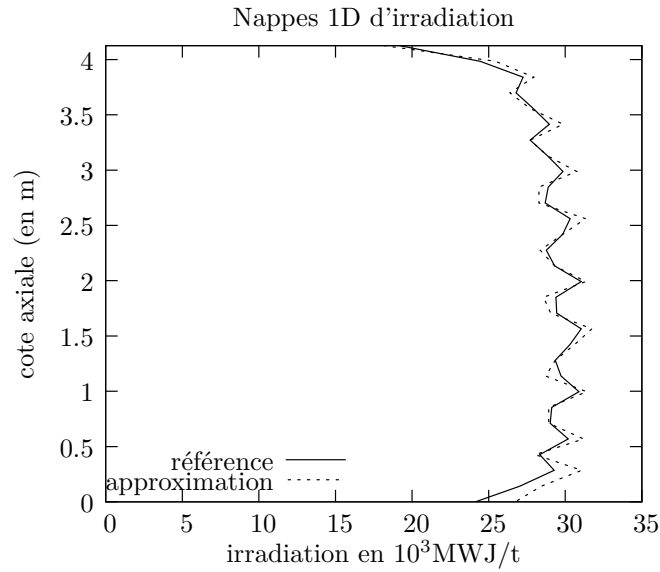


FIG. 8.1. *Nappes axiales d'irradiation en MWJ/t utilisées comme donnée d'entrée de CIREP1D. La nappe de référence correspond à un combustible légèrement moins irradié dans les premières et dernières mailles du maillage du cœur actif. Les variations d'irradiation liées à la présence des grilles de maintien du combustible sont également un peu moins fortes pour le modèle de référence.*

écart tend à s'amortir pour le calcul ébauche obtenu avec le modèle parfait tandis qu'il se maintient dans l'autre cas. Les axial offsets de puissance qui résultent de ces simulations ébauches sont comparés à l'axial offset de référence dans la figure 8.3. Ces axial offsets sont assez proches : seule l'amplitude varie, la fréquence des variations étant dictée par la variation de l'insertion des grappes (qui est commune à toutes simulations). On note que c'est l'axial offset de puissance calculé avec le modèle imparfait qui est le plus éloigné de l'axial offset de référence.

Concentration axiale 1D de xénon (en 10^{15}cm^{-3})

Concentration axiale 1D d'iode (en 10^{15}cm^{-3})

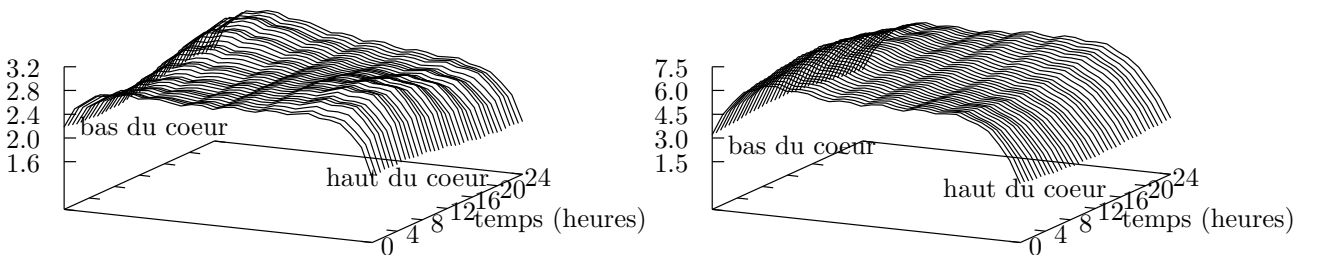


FIG. 8.2. *Simulation avec CIREP1D du transitoire de référence. Les consignes de puissance et d'insertion des grappes sont données dans le tableau 8.1.*

Chaîne d'assimilation : On cherche à mettre en place un système de recalage *en continu* de la dynamique xénon/iode. Il existe deux dispositifs possibles : l'un prenant en compte la dynamique du modèle (4DVAR) et l'autre ne la prenant pas en compte (3DVAR). Le second est bien évidemment moins cher en temps calcul mais on a vu précédemment qu'il n'était pas possible

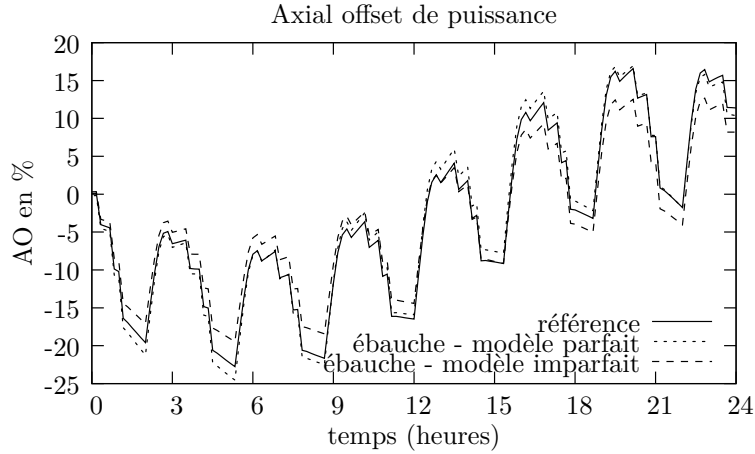


FIG. 8.3. Axial offset de puissance au cours du temps. Les variations de l'axial offset ont des amplitudes différentes mais partagent la même fréquence qui est dictée par la consigne d'insertion des grappes.

de contrôler la concentration initiale d'iode avec un tel schéma (en stationnaire, les quantités observées ne dépendent pas du niveau d'iode). Le premier dispositif est donc préférable même s'il est relativement onéreux (il nécessite des évaluations du modèle direct ainsi que de l'adjoint). Il est possible de construire un dispositif intermédiaire en temps calcul et qualité de l'analyse en prenant en compte la dynamique du système grâce à une approximation linéaire de celle-ci (3DFGAT, [Fis01]). Cette troisième voie n'est pas traitée ici : compte tenu que l'approximation linéaire du modèle de dynamique xénon implémenté dans CIREP1D est aussi chère en temps calcul que le modèle direct, cette voie n'a pas été jugée prometteuse en l'état actuel des choses (voir chapitre 4). Un travail préliminaire à l'implémentation de cette méthode consisterait donc à construire une approximation linéaire du modèle bien moins chère que le modèle lui-même. En conclusion, on propose d'étudier la mise en place d'une chaîne d'assimilation de type 4DVAR. La période de temps considérée pour cette étude est de 24 heures.

Comme dans les chapitres précédents, les observations correspondent à 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure de l'axial offset de puissance et 1 mesure de bore. Ces observations sont générées en bruitant les valeurs obtenues avec le modèle de référence en appliquant une erreur de moyenne nulle et d'écart-type de 30% pour les valeurs de puissance intégrée, une erreur d'écart-type 10% pour l'axial offset et enfin une erreur d'écart-type 1% pour la mesure de bore. La matrice de covariance d'ébauche \mathbf{B} est diagonale par bloc (un bloc pour chacune des deux espèces). L'échelle de corrélation est fixée à $L = 4$ et l'écart-type σ_B utilisé pour la construction de la matrice \mathbf{B} est précisé un peu plus tard.

8.2 Étude de schémas d'assimilation sur 24 heures

8.2.1 Caractéristiques de la chaîne d'assimilation

On propose de mettre en place une chaîne d'assimilation de type 4DVAR où on enchaîne les étapes d'analyse en faisant "glisser" en temps la fenêtre d'assimilation, l'analyse de la fenêtre précédente servant de point d'ébauche pour l'étape suivante d'assimilation (la fin d'une fenêtre coïncide donc avec le début de la suivante). Puisque l'ébauche d'une fenêtre est l'analyse de

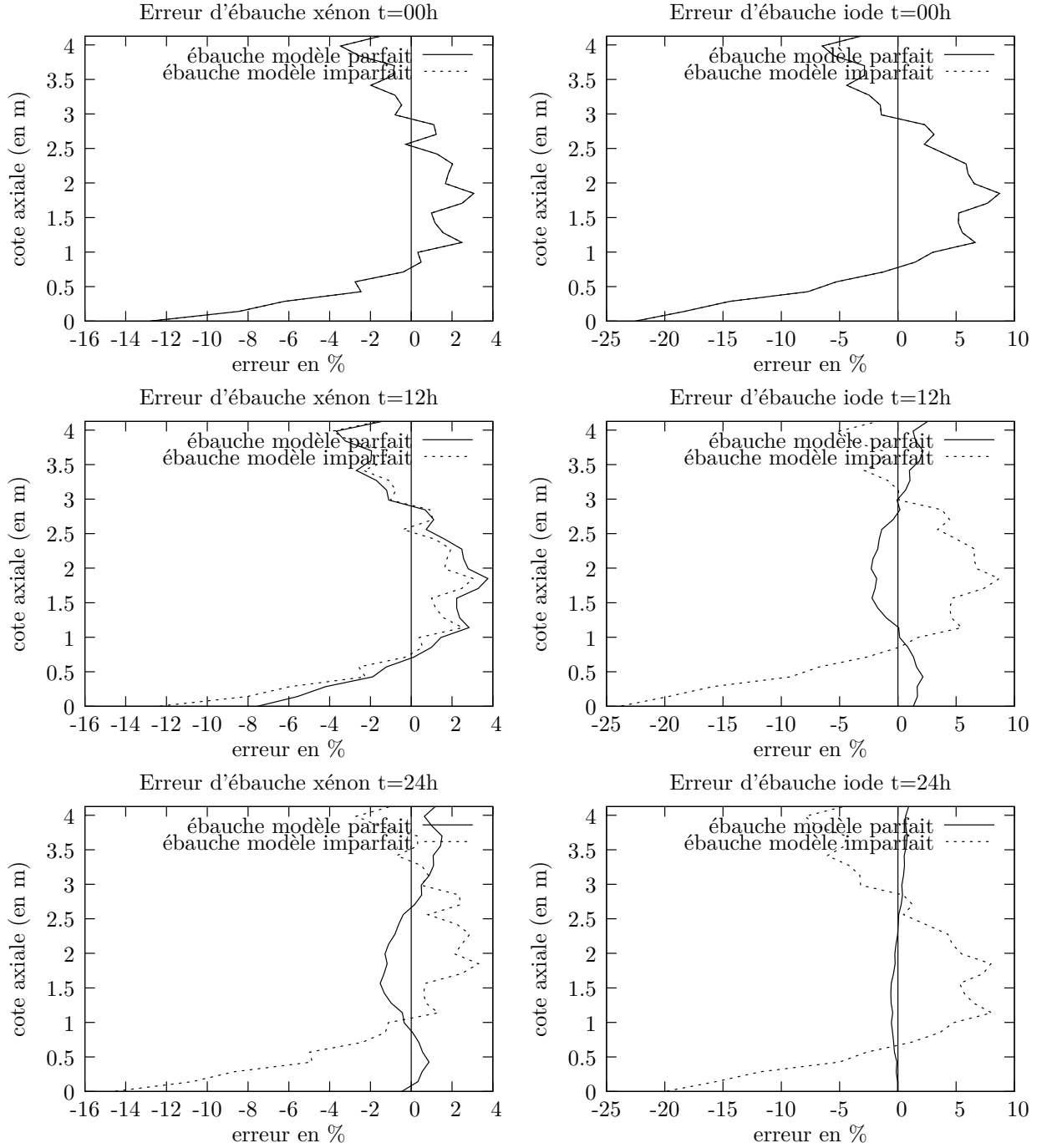


FIG. 8.4. Évolution sur 24 heures des erreurs relatives des concentrations d'ébauche de xénon et d'iode. Dans le premier cas le modèle utilisé pour le calcul ébauche de la dynamique xénon/iode est le même modèle que celui utilisé pour le calcul de référence. Dans le second cas, un changement de la nappe 1D d'irradiation permet d'avoir un modèle imparfait. Les deux modèles sont initialisés en t_0 par les mêmes concentrations de xénon et d'iode. Dans le cas du modèle imparfait, l'erreur d'ébauche tend à augmenter au cours du temps alors que dans le cas du modèle parfait, elle tend à se résorber.

la fenêtre précédente, la matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} de la fenêtre courante devrait correspondre à la matrice de covariance d'erreur d'analyse \mathbf{P}^a de la fenêtre précédente. Cependant on n'implémente pas ici une telle mise à jour de la matrice \mathbf{B} . Cela constitue donc une piste d'amélioration. Il reste à déterminer quel est le niveau d'incertitude à mettre dans l'ébauche, c'est-à-dire à quelle valeur fixer l'écart-type σ_B . Il faut également choisir la taille des fenêtres d'assimilation ainsi que le nombre de temps d'observation à répartir dans chaque fenêtre.

Fréquence des observations : Multiplier la fréquence des observations devrait permettre d'améliorer la qualité de l'analyse. Mais il faut veiller en même temps à ne pas construire un schéma d'assimilation trop coûteux en temps calcul. Or un trop grand nombre d'observations allonge le temps de calcul pour l'assemblage de la fonction coût \mathcal{J} et d'autre part détériore le conditionnement de la hessienne de \mathcal{J} (et donc ralentit la convergence de l'algorithme de minimisation). On fait le choix d'une fréquence d'observation de 1 heure : cette fréquence est compatible avec l'échelle de temps de la dynamique xénon et permet de ne pas trop allonger le temps de calcul de l'analyse lorsque les fenêtres d'assimilation sont de quelques heures.

Taille des fenêtres : Prendre de grandes fenêtres d'assimilation réduit le nombre d'étapes d'analyse et donc augmente le nombre d'observations par fenêtre. Cela doit donc conduire à augmenter la qualité des analyses mais cela conduit aussi à augmenter le temps de calcul ! Le choix de la taille des fenêtres est donc le résultat d'un compromis entre temps calcul et qualité de l'analyse. On teste dans la figure 8.5, la qualité des incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus avec différentes tailles de fenêtre : respectivement 1 heure, 3 heures et 4 heures. Pour chacun de ces cas, la fréquence d'observation est de 1 heure :

- la fenêtre d'1 heure comporte 2 séries d'observation soit 16 mesures assimilées ;
- la fenêtre de 3 heures comporte 4 séries d'observation soit 32 mesures assimilées ;
- la fenêtre de 4 heures comporte 5 séries d'observation soit 40 mesures assimilées.

On observe une correction assez faible de la concentration d'ébauche d'iode quelle que soit la taille de la fenêtre. On constate en revanche une nette amélioration de la concentration xénon pour les fenêtres de 3 et 4 heures. On remarque également dans la figure 8.6 une très bonne prévision de l'axial offset de puissance pour les fenêtres de 3 et 4 heures. Cette amélioration de la prévision de la dynamique a cependant un coût. On donne, dans le tableau 8.2, le coût d'une étape d'analyse pour différentes tailles de fenêtre d'assimilation. On renseigne également le nombre d'évaluations de la fonction coût du 4DVAR \mathcal{J} qui ont été nécessaires pour la convergence de l'algorithme de minimisation. On extrapole ensuite un coût total de l'assimilation sur 24 heures en multipliant le coût d'une étape d'analyse par le nombre d'analyses nécessaires pour couvrir un intervalle de 24 heures. On remarque tout d'abord que l'allongement de la taille de la fenêtre ne conduit pas nécessairement à une augmentation du nombre d'évaluations de la fonction coût. Il ne semble donc pas y avoir d'augmentation de la non-linéarité de la fonction coût avec l'augmentation de la taille de la fenêtre. Mais sans surprise, lorsque la taille de la fenêtre d'assimilation augmente, l'évaluation du modèle de dynamique nécessite alors plus de temps de calcul. Cela conduit à une augmentation globale du temps de calcul pour une étape d'analyse qui n'est pas compensée sur 24 heures par la diminution du nombre d'étapes d'analyse requis. Une piste pour réduire ce coût calcul consisterait à augmenter le seuil du critère d'arrêt (en passant par exemple de 10^{-4} à 10^{-2}).

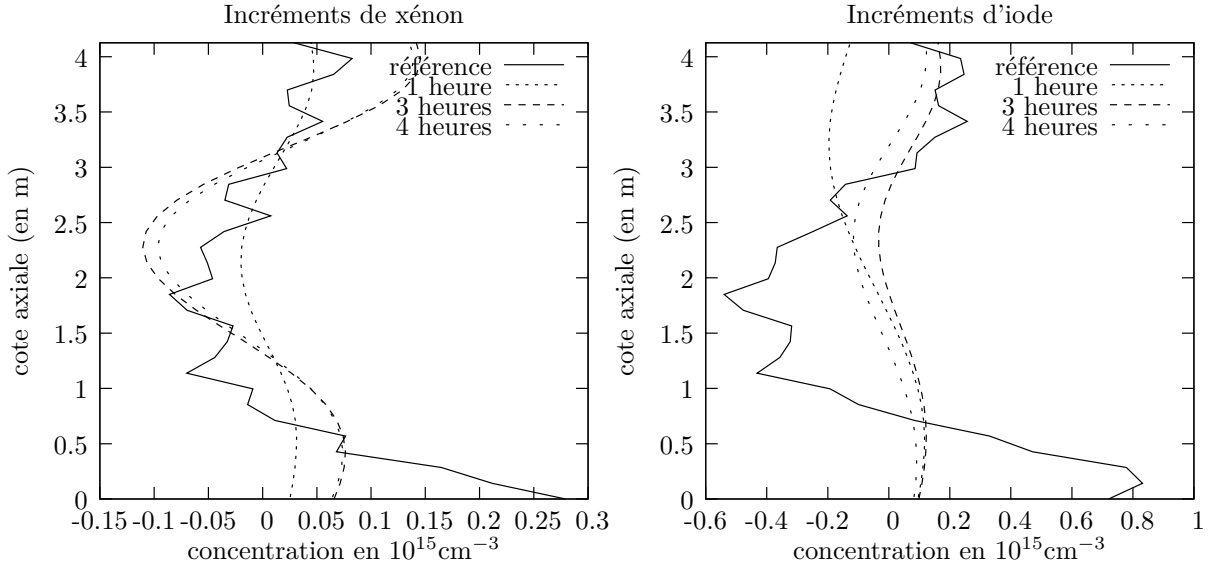


FIG. 8.5. Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 pour différentes tailles de fenêtre d'assimilation. Les expériences sont conduites avec un modèle parfait. La matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} est construite à partir d'un écart-type $\sigma=5\%$ et la matrice des covariance d'erreur d'observation est construite à partir des écarts-types des erreurs d'observation rappelés en début de ce chapitre. La fréquence des observations est de 1 heure.

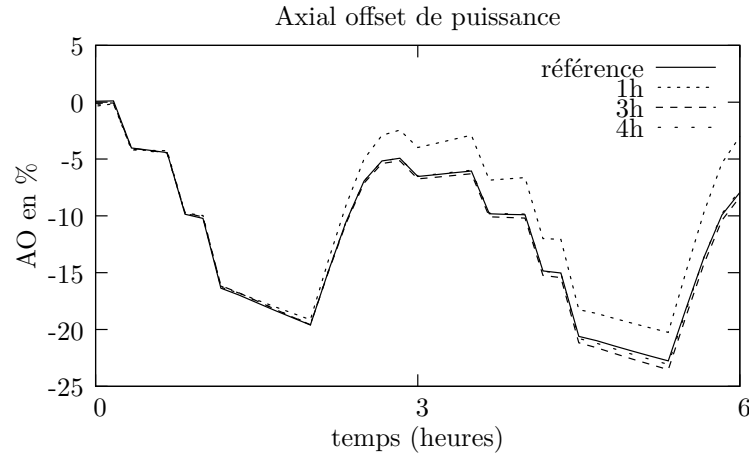


FIG. 8.6. Axial offset de puissance de référence et d'analyse pour des fenêtres de taille 1 heure, 3 heures et 4 heures.

	nombre d'évaluations de \mathcal{J}	coût d'une analyse (temps CPU en hh : mm : ss)	nombre d'analyses	temps CPU total (extrapolé)
1 heure	19	00 : 11 : 12	25	04 : 40 : 00
2 heures	21	00 : 32 : 33	12	06 : 30 : 36
3 heures	22	00 : 52 : 50	8	07 : 00 : 48
4 heures	19	01 : 20 : 01	6	08 : 00 : 06

TAB. 8.2. Comparaison des temps calculs requis pour différentes expériences d'assimilation où l'on a fait varier la taille de la fenêtre d'assimilation (de 1 heure à 4 heures). La fréquence des observations est de 1 heure. La minimisation est réalisée avec l'algorithme BFGS avec un critère d'arrêt de 10^{-4} sur la norme du gradient. Pour information, la machine ayant servi aux calculs est un portable DELL precision M65 doté d'un processeur Intel Core 2 1.66GHz.

Dans la suite, on fait le choix de se limiter à des fenêtres de 3 heures. On met donc en place une chaîne d'assimilation basée sur l'enchaînement de 8 expériences d'assimilation couvrant chacune un intervalle de 3 heures.

Détermination de l'écart-type σ_B : On mène dans la suite deux types d'expérience : le premier consiste à utiliser un modèle parfait tandis que dans le second on souhaite évaluer la performance des algorithmes lorsque le modèle est imparfait¹⁴. On rappelle que ce qui distingue le modèle imparfait du modèle parfait est la nappe 1D d'irradiation donnée en entrée du code CIREP1D. On cherche donc le niveau d'incertitude à mettre dans l'ébauche pour ces deux types d'expérience. On teste les écarts-types suivants :

- $\sigma_B = 5\%$,
- $\sigma_B = 10\%$,
- $\sigma_B = 15\%$.

Les incertitudes sur les observations sont de 30% pour les mesures de puissance intégrée, 10% pour les mesures d'axial offset et 1% pour les mesures de concentration en bore. Dans le cas du modèle parfait, un écart-type de 5% semble être le plus pertinent (voir les incréments d'analyse donnés dans la figure 8.7). Tandis que dans le cas du modèle imparfait, on préfère choisir un écart-type de 10% (figure 8.8).

8.2.2 Expériences enchaînées sur 24 heures

Après avoir précisé les différentes caractéristiques de la chaîne d'assimilation, on enchaîne 8 étapes d'analyse couvrant chacune un intervalle de 3 heures (voir figure 8.9). Chaque analyse est donc calculée à partir de 4 séries de mesure (chaque série contenant comme toujours 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure d'axial offset et 1 mesure de concentration en bore) et d'un terme d'ébauche issu de l'étape d'analyse précédente. On rappelle qu'on ne met pas à jour la matrice de covariance d'erreur d'ébauche entre chaque étape d'analyse. Afin de réduire le coût de l'assimilation, le critère d'arrêt de l'algorithme d'assimilation portant sur le gradient est ramené de 10^{-4} à 10^{-3} .

On présente dans la figure 8.10, les incréments 1D de puissance sur toute la période d'assimilation, soit 24 heures. Le calcul du champ de puissance 1D $P_{comb}(t_i)$ au temps t_i à partir d'un état $\mathbf{X}(t_i)$ au temps t_i correspond à un calcul stationnaire (recherche de bore critique à xénon imposé). On définit l'incrément vrai de puissance à t_i comme l'écart entre le champ de puissance

¹⁴Il n'y a pas de prise en compte d'une matrice de covariance d'erreur modèle.

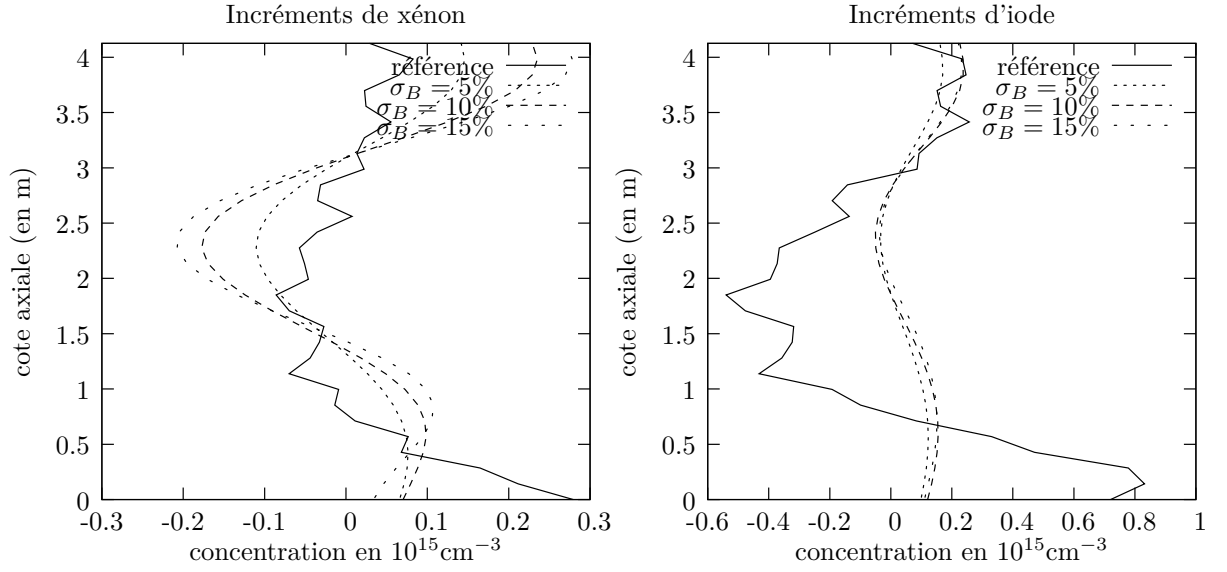


FIG. 8.7. Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 avec modèle parfait. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et on assimile 4×8 mesures.

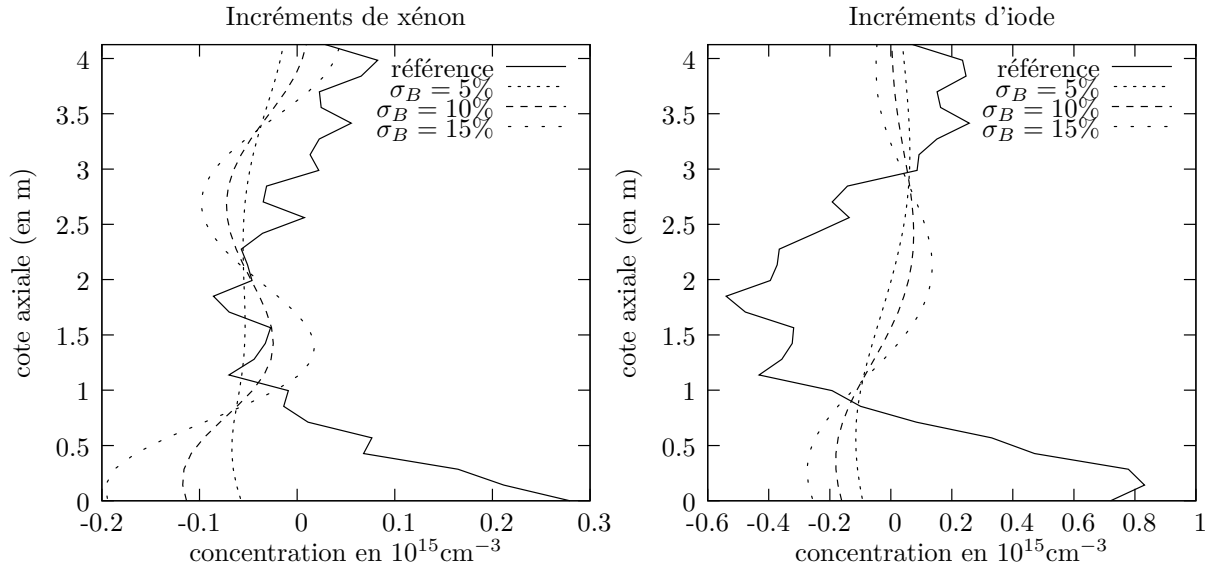


FIG. 8.8. Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 avec modèle imparfait. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et on assimile 4×8 mesures.

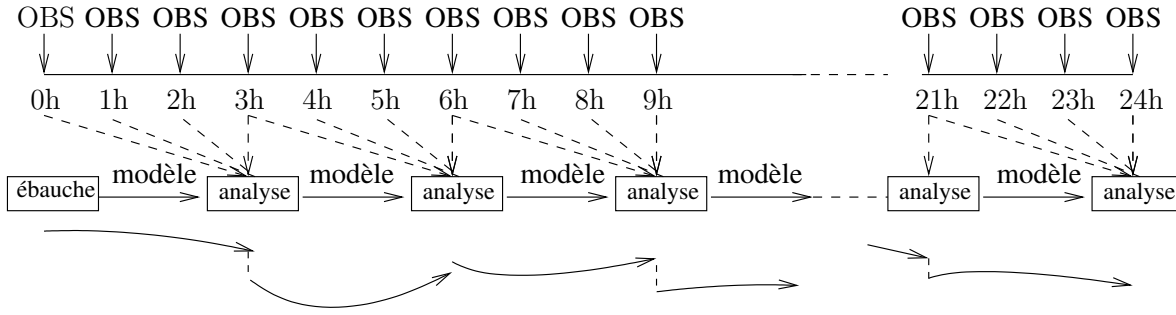


FIG. 8.9. Principe du chaînage de 8 expériences d'assimilation 4DVAR sur une période totale de 24 heures. Le modèle servant à propager le vecteur d'état entre deux analyses est le modèle utilisant la nappe 1D d'irradiation approchée de la figure 8.1.

1D de référence noté $P_{comb}^t(t_i)$ (calculé à l'aide de $\mathbf{X}^t(t_i)$) et le champ de puissance 1D ébauche noté $P_{comb}^b(t_i)$ (calculé à l'aide de $\mathbf{X}^b(t_i)$) :

$$\delta P_{comb}^t(t_i) = P_{comb}^t(t_i) - P_{comb}^b(t_i).$$

De manière similaire, on définit l'incrément d'analyse de puissance à t_i par

$$\delta P_{comb}^a(t_i) = P_{comb}^a(t_i) - P_{comb}^b(t_i).$$

La première remarque qu'on peut faire concerne l'évolution de l'incrément vrai de puissance (en trait plein). On constate qu'il diminue jusqu'à la 17ème heure pour ensuite s'accroître jusqu'à la 22ème heure et diminuer légèrement à la 23ème heure. Cela signifie qu'on est parvenu à se rapprocher suffisamment des valeurs de référence. Aussi l'écart entre l'ébauche et la référence s'est restreint. La raison de la dégradation de la qualité de l'incrément d'analyse à la 15ème heure est peut-être à rechercher dans les heures précédentes. En effet, les deux fenêtres d'assimilation couvrant la période allant de la 12ème heure à la 18ème heure prennent en compte des observations plus entachées d'erreur en moyenne que les fenêtres précédentes. La qualité de l'analyse a donc baissé dans ces deux fenêtres. À partir de la 15ème heure, l'analyse produite (en pointillé) est alors de moins bonne qualité que l'ébauche. Cette baisse de qualité de l'analyse semble se poursuivre jusqu'à la 22ème heure. À la 24ème heure, il semble que la tendance s'inverse. Si on avait mis à jour la matrice \mathbf{B} au début de chaque nouvelle analyse, on peut imaginer qu'avec l'amélioration du terme d'ébauche dans les 15 premières heures, le poids de l'ébauche dans le système d'assimilation aurait augmenté, rendant celui-ci moins sensible à une série de mauvaises mesures.

On présente dans la figure 8.11, les résultats de la même expérience (même jeu d'observation notamment) mais conduite avec un modèle imparfait. On observe la même perte de qualité de l'analyse à partir de la 15ème heure alors que le profil était correctement approché autour de la 5ème heure. On constate par ailleurs une amélioration de l'analyse un peu plus tôt que dans l'expérience avec modèle parfait (à partir de la 21ème heure). Ces résultats devraient être améliorés en intégrant une erreur modèle dans le système d'assimilation et, comme précédemment, en remettant à jour la matrice d'ébauche.

On donne dans les figures 8.12 et 8.13, les axial offsets et les concentrations en bore analysés. On remarque que la perte de qualité du profil 1D de puissance ne s'est pas traduite par une perte de qualité de l'estimation de la concentration en bore et de l'axial offset.

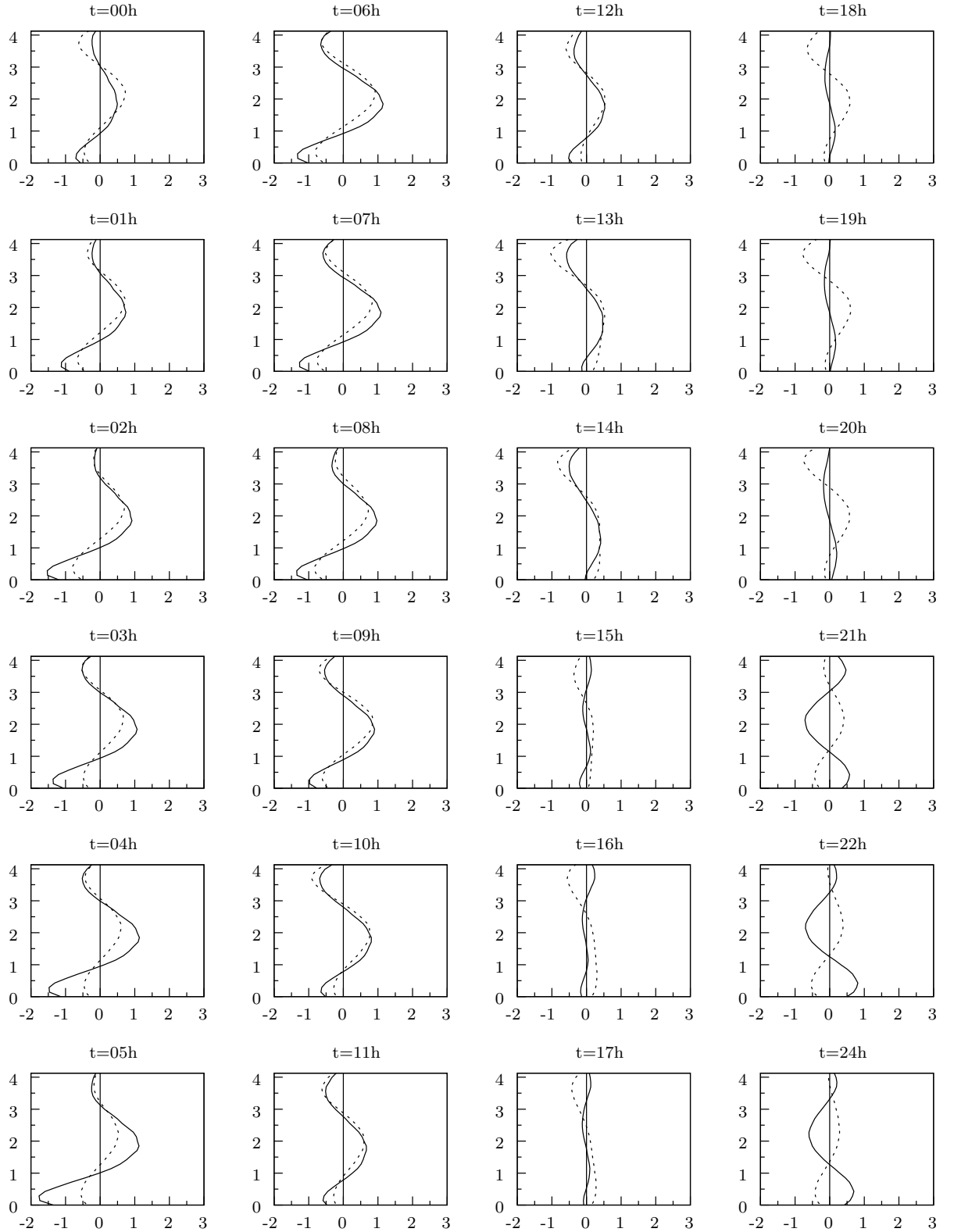


FIG. 8.10. *Incréments de puissance vrai et d'analyse 4DVAR (avec modèle **parfait**)* calculés sur une période de 24 heures et exprimés en MW. Dans chaque figure, l'axe des ordonnées correspond à la cote axiale donnée en mètres ; l'axe des abscisses correspond à la valeur de l'incrément de puissance. La courbe en trait plein correspond à l'incrément de référence et la courbe en pointillé l'incrément d'analyse.

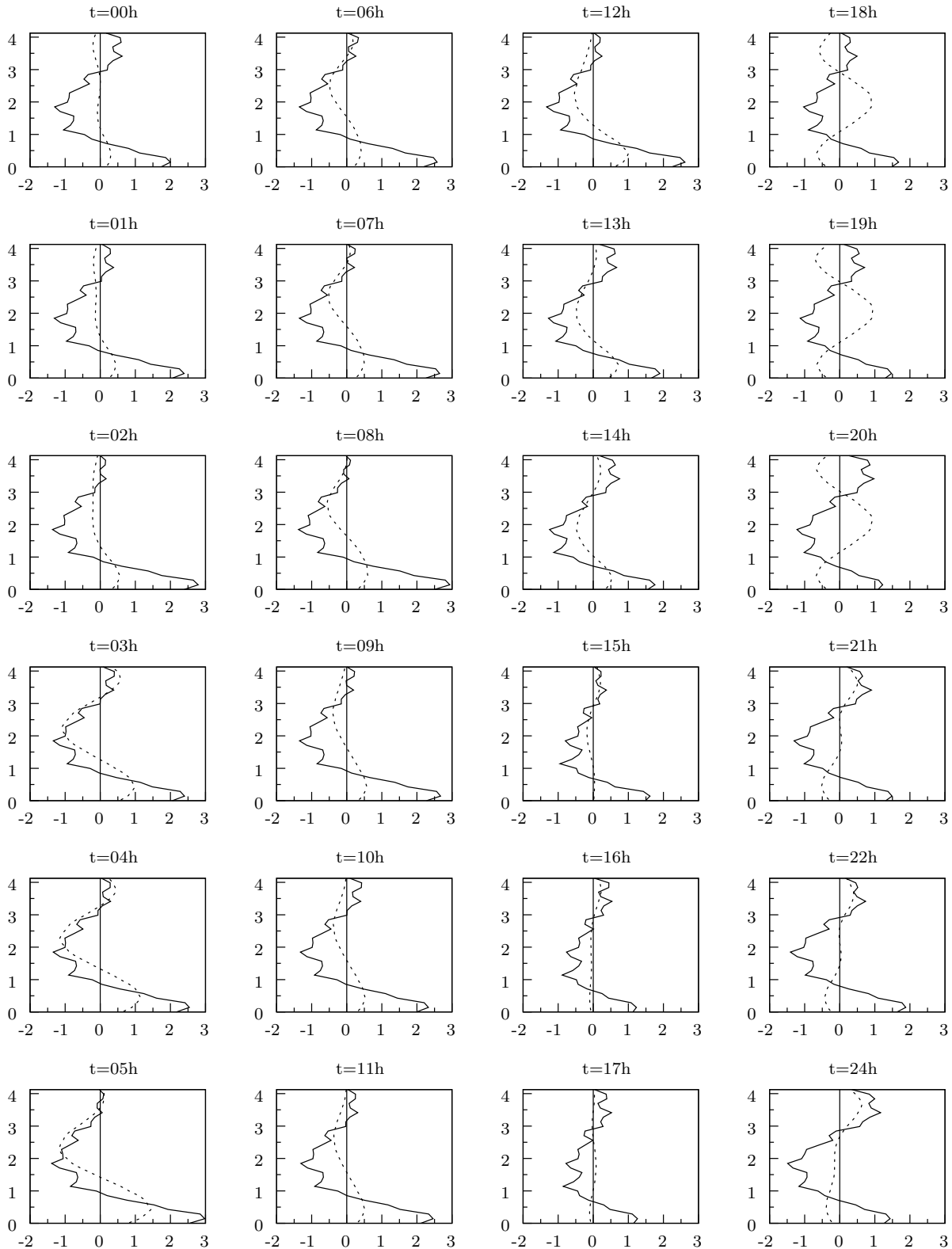


FIG. 8.11. Incréments de puissance vrai et d'analyse 4DVAR (avec modèle *imparfait*) calculés sur une période de 24 heures et exprimés en MW. Dans chaque figure, l'axe des ordonnées correspond à la cote axiale donnée en mètres ; l'axe des abscisses correspond à la valeur de l'incrément de puissance. La courbe en trait plein correspond à l'incrément de référence et la courbe en pointillé l'incrément d'analyse.

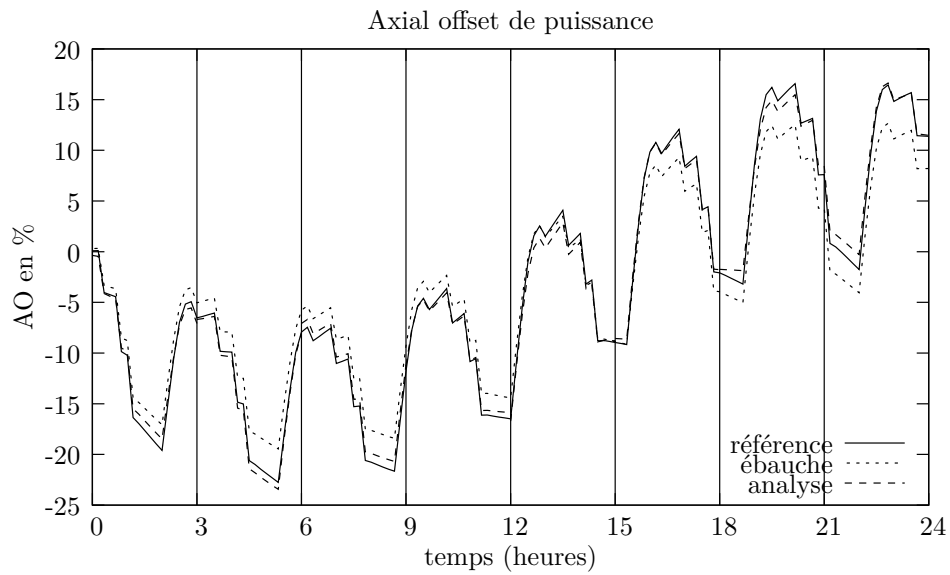


FIG. 8.12. Axial offset de puissance analysé dans le cadre de l'expérience 4DVAR avec modèle **imparfait**. Les traits verticaux délimitent les fenêtres d'assimilation utilisées (ici 8 fenêtres pour une expérience de 24 heures).

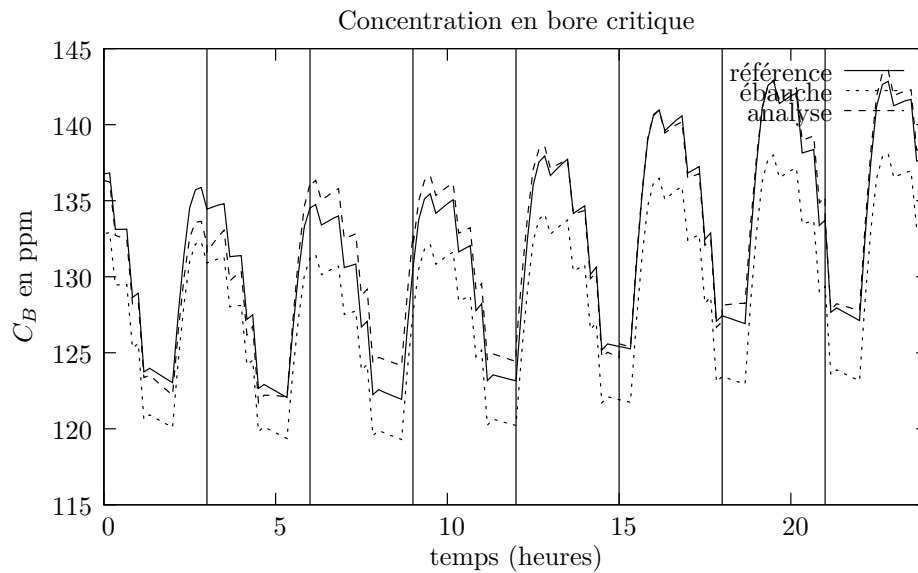


FIG. 8.13. Concentration en bore analysée dans le cadre de l'expérience 4DVAR avec modèle **imparfait**. Les traits verticaux délimitent les fenêtres d'assimilation utilisées (ici 8 fenêtres pour une expérience de 24 heures).

8.3 Réduction du coût de l'assimilation par la réduction de l'espace de contrôle

Pour qu'une chaîne d'assimilation puisse être développée de manière opérationnelle, il est nécessaire de réduire autant que possible le coût de l'assimilation. On propose dans cette section de réduire ce coût en diminuant la taille de l'espace de contrôle. Au lieu d'exprimer la fonction coût en fonction du vecteur d'état \mathbf{X} , on l'exprime en fonction de l'incrément $\delta\mathbf{X}$ défini par $\delta\mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^b$ et on réduit l'espace de minimisation en recherchant un incrément sous la forme d'une combinaison de fonctions cosinus et sinus (voir chapitre 4).

8.3.1 Formulation du problème variationnel

L'expression de la fonction coût du 4DVAR en fonction de l'incrément $\delta\mathbf{X}$ s'écrit

$$\mathcal{J}(\delta\mathbf{X}) = \frac{1}{2}(\delta\mathbf{X})^T \mathbf{B}^{-1}(\delta\mathbf{X}) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \delta\mathbf{X}) \right) \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \delta\mathbf{X}) \right).$$

On rappelle que l'incrément $\delta\mathbf{X}$ de taille n est composé des incréments de concentration de xénon et d'iode de taille $n/2$:

$$\delta\mathbf{X} = (\delta C_{Xe}, \delta C_I)$$

On décompose les incréments de concentration δC_{Xe} et δC_I dans la base de Fourier présentée dans la section 4.1.2, page 99 :

$$\frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^N \left\{ a_n \cos\left(n \frac{2\pi z}{T}\right) + b_n \sin\left(n \frac{2\pi z}{T}\right) \right\},$$

où la période T et la taille de la base N sont à fixer. On a vu dans le chapitre 4 que le paramétrage suivant :

$$\begin{cases} T_{Xe} = 50, & N_{Xe} = 4 \\ T_I = 40, & N_I = 3 \end{cases}$$

permettait de représenter de manière satisfaisante les champs 1D de concentration. On cherche donc à décrire l'incrément $\delta\mathbf{X}$ à l'aide d'une base de taille $m = 16$ contre $n = 60$ précédemment. Le vecteur de contrôle ne correspond donc plus au vecteur d'état \mathbf{X} . Il est composé des $N_{Xe} + N_I + 1$ coefficients a_n et des $N_{Xe} + N_I$ coefficients b_n . Cette décomposition revient à trouver une matrice rectangulaire \mathbf{P} de taille $n \times m$ telle que $\delta\mathbf{X}$ puisse s'écrire sous la forme

$$\delta\mathbf{X} = \mathbf{P}\delta\mathbf{S},$$

où $\delta\mathbf{S}$ est un vecteur incrément de taille m dans la base de Fourier. La fonction coût exprimée dans l'espace \mathbb{R}^m avec $m = 16$ s'écrit alors :

$$\mathcal{J}(\delta\mathbf{S}) = \frac{1}{2}(\delta\mathbf{S})^T \mathbf{P}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{P}(\delta\mathbf{S}) \quad (8.1)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \mathbf{P}\delta\mathbf{S})) \right)^T \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \mathbf{P}\delta\mathbf{S})) \right) \quad (8.2)$$

et le gradient est donné par

$$\nabla_{\delta\mathbf{S}} \mathcal{J}(\delta\mathbf{S}) = \mathbf{P}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{P} \delta\mathbf{S} - \sum_{i=0}^{n_{obs}-1} (\mathbf{H}_{|\mathbf{X}} \mathbf{M}_{i,0|\mathbf{X}} \mathbf{P})^T \mathbf{R}^{-1} \left(\mathbf{Y}_i^{obs} - \mathcal{H}(\mathcal{M}_{i,0}(\mathbf{X}^b + \mathbf{P}\delta\mathbf{S})) \right).$$

avec $\mathbf{X} = \mathbf{X}^b + \mathbf{P}\delta\mathbf{S}$.

La minimisation de (8.1) est conduite à l'aide de l'algorithme BFGS. Le conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} est mauvais (autour de 10^5) mais nous n'avons pas étudié la possibilité de préconditionner au préalable cette fonction coût. Les résultats préliminaires présentés ci-après sont donc obtenus sans préconditionnement de \mathcal{J} .

8.3.2 Comparaison des analyses par rapport à un schéma "complet"

On reprend l'expérience menée précédemment où l'espace du vecteur de contrôle correspondait à l'espace du vecteur d'état. L'espace des observations est identique aux expériences précédentes et les mesures sont bruitées comme précédemment. Enfin on utilise un modèle **parfait**. On compare les incréments d'analyse obtenus d'une part avec l'espace de contrôle défini dans \mathbb{R}^{60} (méthode M60) et d'autre part avec l'espace de contrôle défini dans \mathbb{R}^{16} (méthode M16).

Schéma 3DVAR

On compare les méthodes M60 et M16 sur une expérience 3DVAR (figure 8.14) tout d'abord. On remarque que les deux incréments ne se recouvrent pas dans la moitié inférieure du cœur. On observe d'autre part un renflement dans la partie centrale du cœur pour l'incrément calculé dans \mathbb{R}^{16} . Pour ces deux méthodes, l'incrément xénon est de mauvaise qualité en 3DVAR.

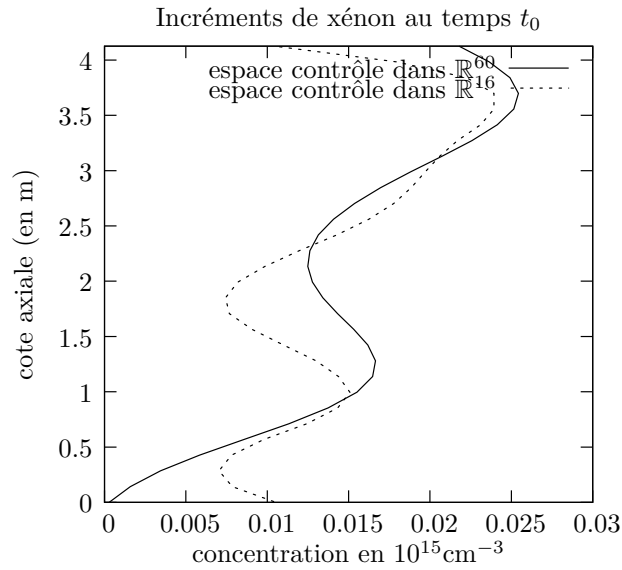


FIG. 8.14. Incréments d'analyse de xénon obtenus avec un schéma 3DVAR et un modèle parfait. Dans un cas la minimisation s'effectue dans l'espace du vecteur d'état (\mathbb{R}^{60}) et dans l'autre dans un espace réduit (\mathbb{R}^{16})

Schéma 4DVAR

On compare maintenant les deux méthodes pour deux schémas 4DVAR :

- le premier est basé sur l'assimilation de 2 séries d'observation (soit 16 mesures) sur une fenêtre de 1 heure (incrément d'analyse donnés dans la figure 8.15) ;

- le second est basé sur l'assimilation de 4 séries d'observation (soit 32 mesures) sur une fenêtre de 1 heure (incrément d'analyse donnés dans la figure 8.16).

On remarque qu'il y a relativement peu de différences entre les incréments d'analyse calculés dans \mathbb{R}^{60} et ceux calculés dans \mathbb{R}^{16} . La méthode M16 reste cependant très chère puisque sans préconditionneur, la résolution du problème de minimisation nécessite 50 itérations de l'algorithme LBFGS pour le deuxième cas test (figure 8.16) contre 19 itérations avec la méthode initiale préconditionnée. Il est possible que le critère d'arrêt utilisé pour la méthode M60¹⁵ ne soit pas adapté à celui de la méthode M16. Néanmoins, on peut dégager 2 pistes possibles de progrès :

- accélérer la méthode M16 en trouvant un préconditionneur ;
- initialiser l'algorithme de minimisation avec un vecteur plus proche de la solution.

Des études ont été menées dans le sens du second item. On a en effet testé l'initialisation du schéma 4DVAR avec la solution du schéma 3DVAR. Malheureusement, cela n'a pas réduit le nombre d'itérations et d'autre part l'algorithme a convergé vers un minimum local. Cela soulève donc un autre problème : la formulation du problème de minimisation sur un espace de plus petite taille peut donc conduire à la création de minima locaux.

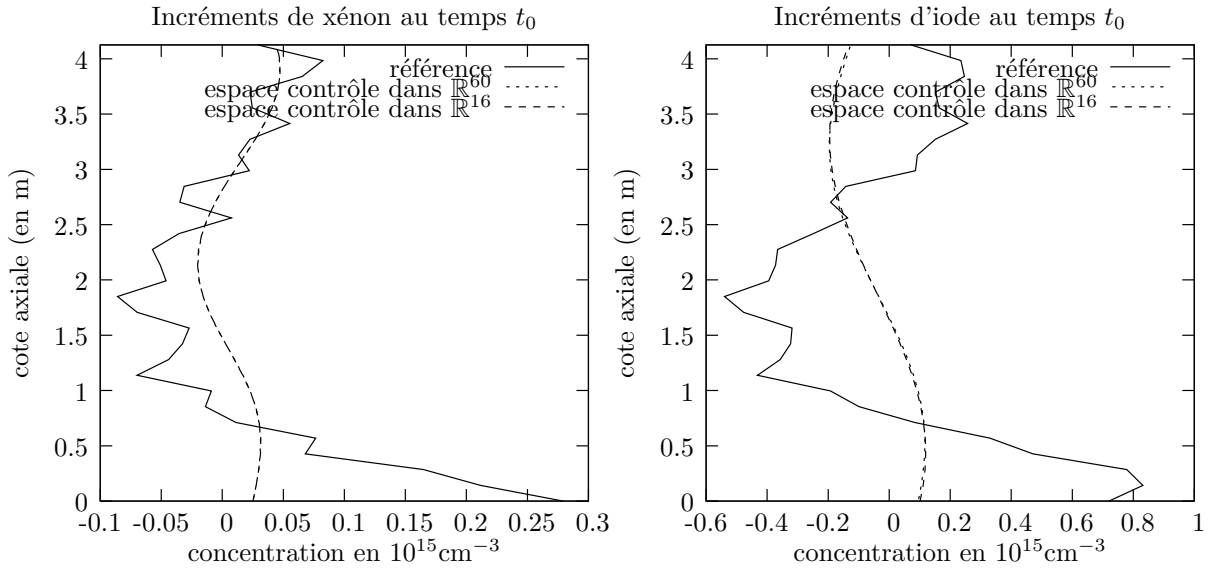


FIG. 8.15. Incréments d'analyse de xénon et d'iode calculés avec les schémas 4DVAR M60 (minimisation dans \mathbb{R}^{60}) et M16 (minimisation dans \mathbb{R}^{16}). La taille de la fenêtre est de 1 heure et 2 séries d'observation sont assimilées (soit 2×8 mesures). Le modèle est parfait.

8.3.3 Résultats préliminaires d'une chaîne d'assimilation 3DVAR sur 24 heures

On propose à présent d'enchaîner plusieurs expériences d'assimilation 3DVAR sur une période de 24 heures selon le dispositif présenté dans la figure 8.17 : l'analyse obtenue au temps précédent t_{i-1} est propagée au temps t_i à l'aide du modèle non parfait $\mathcal{M}_{i,i-1}$ (c'est-à-dire le modèle utilisant la nappe d'irradiation approchée de la figure 8.1) et on dispose toujours d'une fréquence d'observation de 1 heure (1 temps d'observation fournit 8 mesures). On utilise pour

¹⁵Ce critère d'arrêt porte sur la réduction du gradient entre la première et la dernière itération, et est fixé à 10^{-4} .

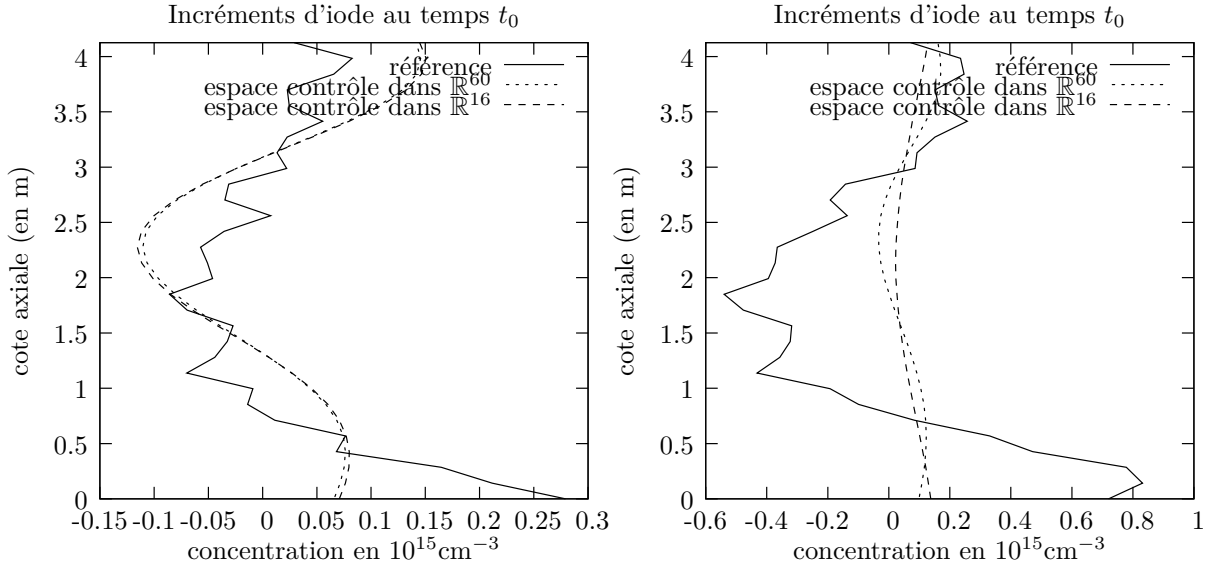


FIG. 8.16. Incréments d'analyse de xénon et d'iode calculés avec les schémas 4DVAR M60 (minimisation dans \mathbb{R}^{60}) et M16 (minimisation dans \mathbb{R}^{16}). La taille de la fenêtre est de 3 heures et 4 séries d'observations sont assimilées (soit 4×8 mesures). Le modèle est parfait.

chaque étape d'analyse la même matrice \mathbf{B} . Les incréments de puissance sont donnés dans la figure 8.18.

On constate que l'incrément vrai est mal approché au début de l'expérience, puis on observe une amélioration de la qualité de l'analyse. Comme pour les expériences 4DVAR précédentes (figures 8.10 et 8.11), on remarque une perte de la qualité de l'analyse vers la fin de l'expérience. Afin de confirmer l'hypothèse que ces dégradations de la qualité de l'analyse sont dues à des séries d'observation plus entachées d'erreur que les autres, on a reproduit la même expérience mais en changeant le vecteur d'erreur introduit dans les mesures (le nouveau vecteur d'erreur suit la même loi que le vecteur précédent). Le résultat de cette expérience, reporté dans la figure 8.19, semble bien confirmer cette hypothèse : l'analyse est de très bonne qualité à partir de la 15ème heure.

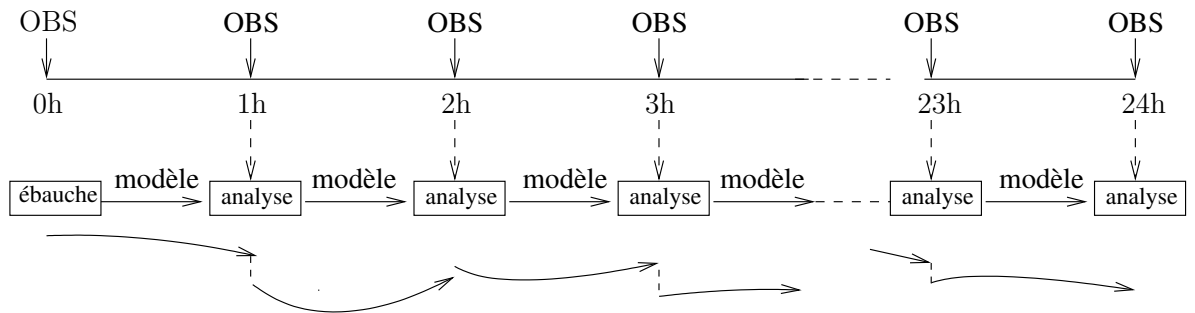


FIG. 8.17. Principe du chaînage de 25 expériences d'assimilation 3DVAR sur une période totale de 24 heures. Le modèle servant à propager le vecteur d'état entre deux analyses est le modèle utilisant la nappe 1D d'irradiation approchée de la figure 8.1 (modèle parfait).

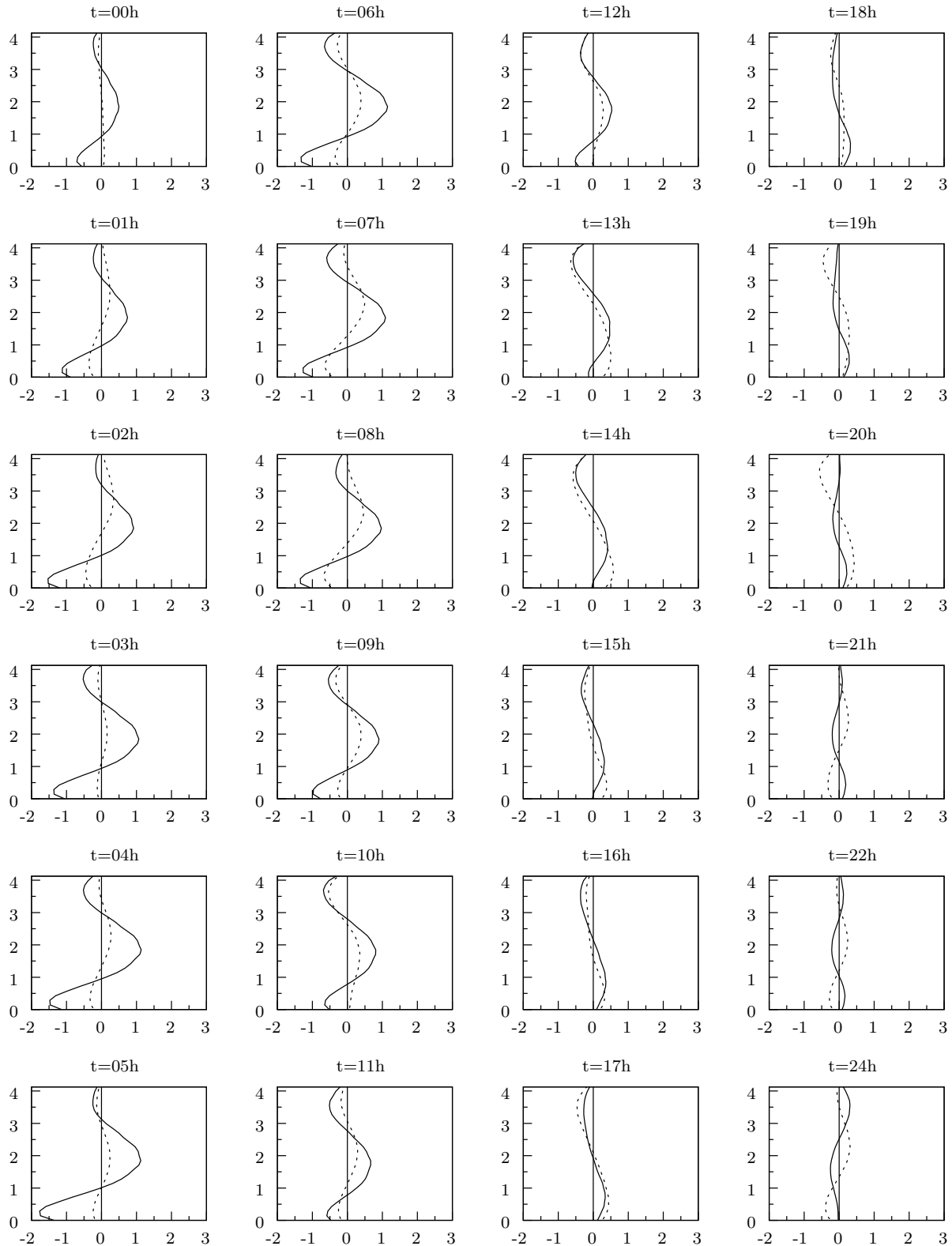


FIG. 8.18. Incréments de puissance vrai et d'analyse 3DVAR (avec modèle **parfait** calculés sur une période de 24 heures et exprimés en MW. Dans chaque figure, l'axe des ordonnées correspond à la cote axiale donnée en mètres; l'axe des abscisses correspond à la valeur de l'incrément de puissance. La courbe en trait plein correspond à l'incrément de référence et la courbe en pointillé l'incrément d'analyse.

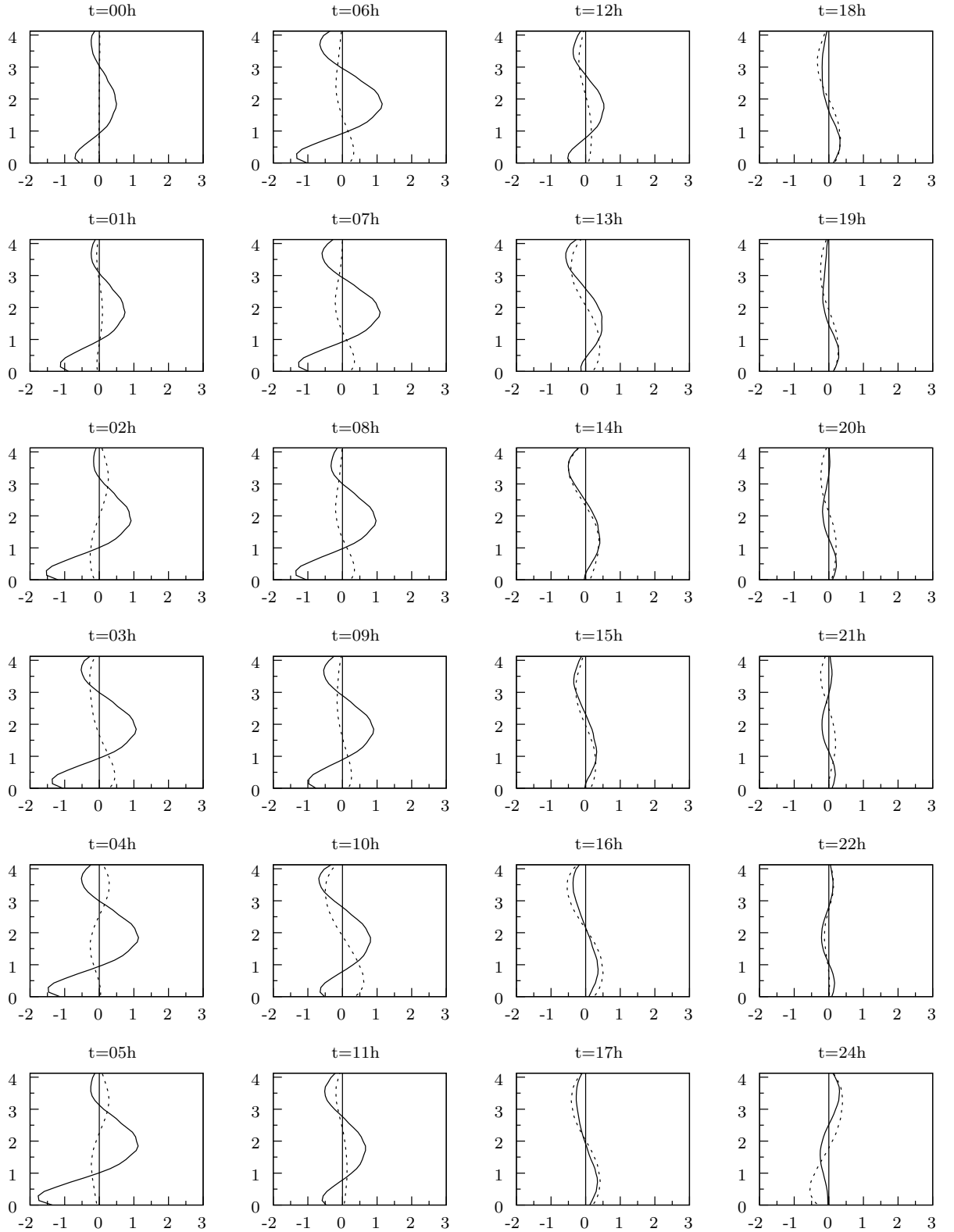


FIG. 8.19. *Incréments de puissance vrai et d'analyse 3DVAR. L'expérience d'assimilation est la même que celle de la figure 8.18. Seules les observations ont changé (on a introduit un autre bruit dans les mesures). Dans chaque figure, l'axe des ordonnées correspond à la cote axiale donnée en mètres; l'axe des abscisses correspond à la valeur de l'incrément de puissance. La courbe en trait plein correspond à l'incrément de référence et la courbe en pointillé l'incrément d'analyse.*

8.4 Synthèse

Dans ce chapitre, on a exploré la possibilité d'enchaîner plusieurs schémas d'assimilation variationnelle afin de **recaler en continu un outil d'aide au pilotage** tel que celui présenté dans le chapitre précédent. On a montré qu'avec une fenêtre de 3 heures où étaient répartis 4 temps d'observation (ce qui correspond à 32 mesures), il était possible de recalculer en continu la dynamique couplée xénon/iode que ce soit avec un **modèle parfait ou imparfait**. On a également exploré la piste de la **réduction du coût de l'assimilation en diminuant la taille de l'espace du vecteur de contrôle**. Bien que les résultats soient satisfaisants du point de vue des incréments d'analyse dont la qualité est très proche de celle des incréments calculés dans l'espace du vecteur d'état, il reste à améliorer le conditionnement de la matrice hessienne afin que l'étape de minimisation soit moins coûteuse.

D'autres pistes de recherche ont été soulevées lors de ces études. Lors d'une étape d'analyse à la suivante, **la matrice de covariance d'ébauche devrait être remise à jour**. Cela permettrait notamment de ne pas dégrader avec un nouveau jeu d'observation fortement erroné un état correctement corrigé. Cette remise à jour pourrait être envisagée à partir des équations du filtre de Kalman. Cela remet en cause le choix de schémas d'assimilation variationnelle. Un algorithme de type filtre pourrait donc être plus adapté à ce type de problématique qui n'impliquera vraisemblablement pas de modèles 3D mais des modèles simplifiés 2D ou 1D pour lesquels le stockage des matrices ne serait pas rédhibitoire. Un filtre de Kalman permettrait d'autre part de **prendre en compte une erreur modèle**. On a d'ailleurs montré que la dynamique xénon/iode était très sensible à la nappe 1D d'irradiation. Une erreur modèle permettrait de tenir compte des approximations inévitables réalisées dans l'estimation 1D, 2D et aussi 3D de l'irradiation du combustible. On peut même se demander s'il ne serait pas judicieux d'**intégrer la nappe d'irradiation dans le vecteur d'état** même si cela augmenterait de manière importante le coût de l'assimilation.

Conclusion générale

Synthèse des travaux

L'assimilation de données fut d'abord appliquée, de manière opérationnelle, à la météorologie. Puis cette technique s'est étendue à d'autres domaines des sciences de la terre comme l'océanographie ou la chimie atmosphérique. Compte tenu des succès rencontrés, elle commence aujourd'hui à percer dans d'autres communautés scientifiques. L'objectif de cette thèse était d'étudier le potentiel des différentes techniques d'assimilation de données pour la modélisation en dynamique des cœurs de centrale nucléaire. Il s'agissait d'identifier les outils de l'assimilation appropriés aux problèmes de neutronique et de pointer les difficultés éventuelles qu'il faudrait dépasser pour une mise en opérationnel du schéma d'assimilation.

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés au problème concret de la prévision des oscillations axiales de xénon dans un cœur de type REP pour lequel nous avons développé un modèle 1D non linéaire de dynamique couplée xénon/iode (représentation axiale du cœur). Ce code simplifié, nommé CIREP1D, répond à deux impératifs : disposer d'un code rapide en temps de calcul pour simuler des transitoires longs (de quelques heures à quelques jours) et disposer des codes linéaires tangent et adjoint du modèle pour pouvoir tester aisément différentes méthodes sans avoir à recourir aux différences finies. À l'heure actuelle il n'existe pas à EDF de code de neutronique pour lequel les codes tangent et adjoint soient disponibles. CIREP1D intègre un module de neutronique 1D (représentation axiale) à deux groupes d'énergie, un module de thermique du combustible 1D (représentation radiale du crayon), un module de thermohydraulique monophasique 1D (représentation axiale) et pour coupler l'ensemble un module de contre-réactions linéaires par morceaux. Bien que simplifié, CIREP1D est représentatif des effets physiques en cœur. Avec ce modèle, nous avons exhibé des transitoires xénon convergents, c'est-à-dire des transitoires pour lesquels l'oscillation xénon s'amortit et des transitoires divergents où au contraire l'oscillation s'amplifie. Nous avons relié ce comportement à l'avancement du cœur dans le cycle : en fin de cycle, l'usure du combustible se traduit par une diminution des sections de fission qui engendre une instabilité dans la dynamique xénon à travers l'augmentation du flux et donc du terme non linéaire $\sigma_{Xe}\Phi C_{Xe}$ de la dynamique xénon. Les codes tangent et adjoint ont été obtenus par différentiation automatique avec l'outil TAPENADE développé à l'INRIA.

Pour améliorer la prévision de la dynamique non linéaire du xénon, nous nous sommes tournés vers les méthodes variationnelles plutôt que vers les méthodes de type filtre. Ce choix a été guidé par la volonté de tester des schémas plus adaptés à des cas industriels 3D. Malgré les nombreux travaux visant à réduire leur coût, les méthodes de type filtre restent en effet relativement inadaptées à des problèmes de grande taille du fait de la manipulation de nombreuses matrices. Afin de pouvoir comparer la qualité des différents schémas d'assimilation 3DVAR et 4DVAR, nous avons choisi de nous placer dans le cadre des expériences jumelles.

Le xénon étant essentiellement produit par décroissance radioactive de l'iode, sa dynamique est étroitement liée à celle de l'iode. Nous nous sommes donc intéressés au recalage des concentrations initiales de la dynamique couplée xénon-iode. Le vecteur d'état de cette dynamique est composé des concentrations 1D de xénon et d'iode discrétisées sur le maillage 1D de CIREP1D. Ce vecteur est de petite taille ($n=60$) ce qui permet de s'affranchir de coûts de calcul trop élevés et facilite donc les études. Dans un premier temps, nous avons choisi d'exprimer la fonction coût du 4DVAR dans l'espace du vecteur d'état : pour ces expériences, le vecteur de contrôle appartient à \mathbb{R}^{60} . Dans un second temps, nous avons souhaité réduire la taille du vecteur de contrôle afin de réduire le coût de la minimisation. Nous avons alors exprimé la fonction coût en fonction non plus du vecteur d'état \mathbf{X} mais du vecteur incrément $\delta\mathbf{X} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^b$. Au lieu de rechercher ce vecteur dans \mathbb{R}^{60} , nous l'avons recherché dans un espace de taille 16 engendré par une base de Fourier. La modélisation de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} correspond à une modélisation univariée : nous avons supposé qu'il n'existait pas de corrélation entre les erreurs d'ébauche du xénon et les erreurs d'ébauche de l'iode. Nous avons en revanche modélisé des corrélations spatiales pour chacune de ces deux espèces.

Bien qu'étant dans le cadre des expériences jumelles, nous avons souhaité construire un vecteur d'observation le plus réaliste possible. Nous avons donc choisi d'assimiler à chaque temps d'observation, 6 mesures de puissance intégrées (pouvant correspondre aux mesures d'activités délivrées en continu par les chambres externes), 1 mesure de l'axial offset de puissance et 1 mesure de concentration en bore. Les erreurs de mesure de ces différentes variables ont été évaluées à respectivement 30%, 10% et 1%. La matrice de covariance d'erreur d'observation a été choisie diagonale (pas de corrélation entre les erreurs de mesure).

Le système d'assimilation ainsi construit repose sur le contrôle d'un vecteur dans \mathbb{R}^{60} ou \mathbb{R}^{16} à travers l'assimilation de vecteurs d'observation dans \mathbb{R}^8 . La taille de ce système d'assimilation est donc très éloignée de celles des systèmes d'assimilation rencontrés en météorologie où les vecteurs d'état et d'observation avoisinent plutôt les millions de composantes. Une autre caractéristique de ce système d'assimilation pour la dynamique xénon est la complexité de l'opérateur d'observation. Celui-ci correspond en effet à la résolution en stationnaire des équations couplées de neutronique et de thermique/thermohydraulique (calcul de recherche de bore critique à concentration xénon imposée). On rappelle qu'un calcul de dynamique xénon est une suite de calculs stationnaires. Le coût de l'application de l'opérateur d'observation sur un vecteur d'état est donc du même ordre de grandeur que celui du calcul de la dynamique xénon sur un pas de temps. Une dernière particularité de ce système est la distribution spatiale régulière des observations de type 1D (puissances intégrées) : on n'y rencontre pas comme en météorologie de zones spatiales pauvres en mesures.

Pour résoudre le problème de minimisation posé par la formulation 4DVAR, nous avons implémenté les algorithmes de minimisation suivants : un gradient non linéaire, un quasi-Newton ainsi qu'un Gauss-Newton (et quelques-unes de ses nombreuses variantes). Ces algorithmes nécessitent le calcul du gradient de la fonction coût et requièrent donc de disposer du modèle tangent ou adjoint du modèle direct. On rappelle que ces deux modèles ont été obtenus par différentiation automatique de CIREP1D. En météorologie, la méthode de Gauss-Newton est très populaire puisqu'elle permet de dégrader la précision du modèle utilisé dans les boucles internes de l'algorithme et donc d'abaisser le coût de la minimisation. Dans nos applications, cette méthode ne s'est pas montrée aussi performante et nous lui avons préféré l'algorithme de quasi-Newton.

Contributions de la thèse

Différents modèles ont été proposés afin de mieux appréhender la dynamique xénon. Les modèles les plus répandus sont les modèles où seule la dynamique moyenne du xénon et de l'iode est prise en compte ainsi que les modèles bi-points où la dynamique du xénon est décrite pour les moitiés inférieure et supérieure du cœur. On rencontre également des modèles linéarisés autour du point d'équilibre. Dans ce cas, les variables de flux, xénon et iode sont développées sur des bases de modes propres plus ou moins complètes. Dans l'ensemble de ces modèles, le couplage entre la neutronique et la thermique/thermohydraulique est toujours réduit à un simple terme correctif dans l'équation de flux. La thermique du combustible et la thermohydraulique ne sont donc pas modélisées. Les paramètres de certains de ces modèles sont recalés grâce à des mesures de l'axial offset de puissance. Des méthodes simples (moindres carrés par exemple) peuvent être employées pour résoudre ce problème d'estimation de paramètres, comme des méthodes plus évoluées (estimateurs stochastiques ou algorithmes génétiques). Très peu de travaux s'intéressent au problème de la méconnaissance des concentrations de xénon et d'iode au début de la simulation. Il semble que les seuls travaux proposant le recalage des concentrations 1D de xénon et d'iode sont basés sur le calcul d'un terme correctif appliqué aux concentrations 1D à l'équilibre et en posant des hypothèses très fortes [Son96]. D'autre part, la seule méthode d'assimilation utilisée pour améliorer la simulation de la dynamique xénon est le filtre de Kalman (pour des problèmes d'estimation de paramètres) mais sans l'adoption du formalisme de l'assimilation de données (terme d'ébauche, erreurs de mesure...).

Cette thèse s'inscrit donc dans une démarche novatrice en proposant d'appliquer les techniques d'assimilation issues du domaine de la prévision météorologique pour l'estimation des conditions initiales de la dynamique couplée xénon-iode. Ce recalage doit permettre de disposer d'une photographie plus précise de l'ensemble du cœur (champ 1D de température par exemple) non possible avec les modèles simplifiés listés un peu plus tôt. Nous avons recensé les différents types d'informations disponibles sur le système. Nous avons inclus des mesures d'une autre nature que les mesures de l'axial offset de puissance et nous avons introduit une estimation *a priori* de l'état initial qui peut être l'état à l'équilibre ou un état calculé par une précédente simulation. Enfin nous avons cherché à estimer le niveau de confiance dans ces différents types d'information notamment en identifiant les inévitables erreurs de mesure, afin de retrouver l'état initial le plus vraisemblable de cette dynamique.

Nous avons montré qu'en présence d'erreurs de mesure, les informations de type puissance intégrées n'étaient pas suffisantes pour retrouver une estimation satisfaisante de l'état du cœur. L'ajout de mesures de type axial offset de puissance et concentration en bore a permis d'améliorer l'estimation des concentrations initiales mais aussi l'estimation plus générale de l'état du cœur comme l'axial offset de puissance qui est une information importante du point de vue du pilotage. Nous avons également montré le rôle indispensable du terme d'ébauche tant du point de vue de la qualité de l'analyse produite (l'ébauche permet de lisser les profils 1D de concentration xénon et iode) que du point de vue de la résolution numérique du problème de minimisation (le terme d'ébauche améliore le conditionnement de la fonction coût et fournit un point d'initialisation de l'algorithme de minimisation raisonnable). Ces propriétés se maintiennent même lorsque la confiance dans l'ébauche est moyenne.

Nous avons proposé deux applications concrètes où l'amélioration de la simulation de la dynamique du xénon permet d'assurer un meilleur suivi de la centrale. La première application correspond au recalage ponctuel d'un outil de suivi en ligne après une perte sur une période de temps, de ses données d'entrée. Nous avons montré qu'un schéma 3DVAR n'était pas satisfaisant

puisqu'il ne permettait pas de contrôler l'iode. Puis nous avons décrit un schéma d'assimilation permettant de reprendre le suivi de charge plus rapidement que ce qui est envisagé actuellement (moins de six heures contre une trentaine d'heures). Dans la seconde application, nous avons proposé un recalage non plus ponctuel mais continu d'un outil de suivi en ligne comme cela se passe pour la prévision météorologique. Ce recalage continu est une réponse au problème du choix de l'ébauche puisque dans cette configuration, l'ébauche est fournie par l'étape d'analyse précédente. A cette occasion, nous avons exploré la possibilité de réduire le coût de l'assimilation en diminuant la taille de l'espace de contrôle (de \mathbb{R}^{60} à \mathbb{R}^{16}). L'étude de faisabilité menée sur une période de 24 heures a fourni des résultats préliminaires encourageant à poursuivre.

Perspectives

Pour initier cette partie consacrée aux perspectives de recherche ouvertes par ce travail de thèse, on propose de débattre de l'intérêt de la différentiation automatique pour les codes industriels et notamment pour le futur code de cœur d'EDF. L'intérêt croissant pour les études d'incertitude et les techniques d'assimilation pose actuellement la question du mode d'obtention des modèles tangent et adjoint de grands codes, lorsqu'ils n'existent pas (cas des codes de neutronique d'EDF par exemple).

De manière générale, la différentiation automatique est un outil intéressant qui permet d'une part d'apporter de manière continue des corrections au code original sans coût supplémentaire pour la maintenance des codes tangent et adjoint correspondant et d'autre part de changer à loisir les sorties à dériver et les entrées. Ce point est un véritable atout dans le cadre d'un travail prospectif. De plus, le retour d'expérience sur l'outil TAPENADE développé à l'INRIA est très positif. C'est un outil souple d'utilisation (peu intrusif dans le code) et très facile à prendre en main. Mais l'intérêt présent et futur de la différentiation automatique pour les codes industriels est en revanche loin d'être acquis. En effet, les différentiateurs automatiques ne sont pas réputés pour produire des codes performants du point de vue du temps calcul. D'autre part, la généralisation du langage C++ pour les grandes codes hypothèque l'intérêt d'une telle approche : les différentiateurs existant pour le C++ fonctionnent sur le mode de la surcharge d'opérateur (comme ADOL-C) et sont donc intrusifs. On peut se demander si la différentiation avec de tels outils ne nécessite pas autant de travail que celui nécessaire au développement planifié du code adjoint d'un code C++ bien structuré.

Le développement des méthodes d'assimilation pour les codes opérationnels de prévision météorologique a imposé l'existence des modèles tangent et adjoint des modèles de météorologie. Cette pratique n'est pas très répandue en dehors de la communauté des assimileurs. A l'occasion du développement du successeur du code de cœur de référence d'EDF, il serait donc plutôt souhaitable de prévoir conjointement le développement des modes tangent et adjoint.

Le prolongement naturel de ce travail de thèse est la mise en place de manière opérationnelle d'un algorithme d'assimilation pour obtenir un véritable outil de suivi en ligne à la manière de ce qui est fait en météorologie pour la prévision. Dans cette perspective, on peut dégager différents axes de progrès pour d'une part améliorer la qualité de l'analyse et d'autre part diminuer le coût de l'assimilation. Il s'agit tout d'abord de la modélisation de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche. Celle-ci ne prend pas en compte de corrélation entre les erreurs d'ébauche xénon et les erreurs d'ébauche iode (modélisation univariée). Pourtant lorsque l'ébauche est issue d'une précédente analyse, la modélisation multivariée de la matrice \mathbf{B} semble se justifier. Cela permettrait d'autre part de probablement mieux contrôler l'iode qui est moins sensible aux variations

sur les observations que le xénon, voire de rendre possible l'utilisation du 3DVAR bien moins coûteux que le 4DVAR. L'établissement d'une contrainte multivariée entre les concentrations de xénon et d'iode à partir des équations de la dynamique linéarisée xénon-iode ne semble pas être la bonne piste. Peut-être faudrait-il s'appuyer sur un modèle de dynamique plus simplifié (modèle point par exemple) mais non-linéaire pour au moins fixer le niveau de concentration initial d'iode? Une piste peut être plus prometteuse serait l'estimation de la matrice \mathbf{B} par une méthode d'ensemble. Il faudrait alors identifier un panel de transitoires caractéristiques et vérifier si la matrice ainsi construite n'est pas sensible à l'avancement dans le cycle. Dans ce cas, on pourrait décider de construire différentes matrices \mathbf{B} en fonction du niveau d'irradiation du cœur. Il reste la question de la mise à jour de \mathbf{B} . Une manière de propager implicitement la matrice \mathbf{B} est de la faire dépendre de l'ébauche (par exemple relier l'échelle de corrélation au vecteur d'ébauche). Mais la mise à jour la plus optimale de la matrice \mathbf{B} reste celle du filtre de Kalman. On a rappelé précédemment que les méthodes de type filtre n'étaient encore pas très adaptées aux systèmes de grande taille. Mais si le système d'assimilation visé en opérationnel reste monodimensionnel, le stockage de matrices et les opérations matricielles requises pour la mise à jour de la matrice de prévision du filtre de Kalman, sont envisageables. Après plusieurs étapes d'analyse, la matrice \mathbf{B} devrait alors être mieux estimée.

Si cette dernière piste est concluante (en terme de qualité de l'analyse), on pourrait envisager de remplacer le schéma variationnel par un filtre de Kalman étendu. Si cependant le coût semble encore trop élevé, il faudrait tester des filtres sous-optimaux [Tod94]. D'autre part, l'implémentation de ce filtre requiert la modélisation d'une erreur modèle. Cette erreur modèle permettrait de tenir compte à la fois des approximations faites dans le modèle 1D et des différentes approximations réalisées dans la construction des données du modèle. On sait par exemple que le passage de la modélisation 3D à la modélisation 1D nécessite la constitution d'une bibliothèque neutronique obtenue dans des conditions de référence qui ne sont pas celles dans lesquelles la simulation est conduite. La modélisation de l'erreur modèle est cependant une tâche très délicate.

Cette question d'erreur modèle soulève une large réflexion sur la prise en compte des approximations réalisées tout au long de la modélisation de la dynamique du cœur. L'erreur modèle provient d'une part de la modélisation 1D du cœur (pas de description radiale) mais aussi des données 1D qui sont calculées à partir des données 3D. Au cours des différentes expériences menées dans cette thèse, on a constaté que les simulations étaient très sensibles à la donnée de la nappe 1D d'irradiation. Cette nappe 1D est obtenue par condensation d'une nappe 3D qui est elle-même le résultat d'une simulation numérique. Si on parvient à montrer que l'approximation réalisée sur la nappe 1D d'irradiation est un facteur important dans la simulation de la dynamique xénon, alors il serait probablement plus intéressant de chercher à corriger cette nappe d'irradiation plutôt que de prendre en compte une erreur modèle. Le vecteur d'état ne serait alors plus seulement composé des concentrations 1D de xénon et d'iode mais aussi de la nappe 1D d'irradiation. Il s'ensuivrait une augmentation du coût de l'assimilation dû à l'accroissement de la taille du problème et peut-être à la complexification de la fonction coût (perte du caractère quasi-quadratique). Mais le contrôle de la nappe d'irradiation permettrait de simuler des dynamiques xénon dans un cadre plus réaliste.

A

Un modèle point pour la modélisation des oscillations xénon

A.1 Introduction

On présente le modèle monogroupe à deux points proposé par Onega et Kisner en 1977 [One78]. Ce modèle a fait l'objet d'études de recalage de paramètres neutroniques (coefficient de diffusion D , section d'absorption microscopique du xénon σ_{Xe} , paramètre de contre-réaction α_F) [One79]. Un exemple de simulation réalisé avec ce modèle implémenté en Python est proposé en fin de chapitre.

Ce modèle prend en compte la dynamique non linéaire du xénon et de l'iode en 1D et inclut un modèle de dynamique 1D du flux neutronique. La contre-réaction de température est modélisée à l'aide d'un terme correctif dans l'équation de flux. Le développement à l'ordre 1 du flux, du xénon et de l'iode sur le mode fondamental et la première harmonique permet d'obtenir la dynamique des déséquilibres axiaux du xénon, de l'iode et du flux (modèle point des déséquilibres axiaux).

A.2 Modèle 1D flux/xénon/iode

On donne ci-dessous la formulation "classique" monogroupe et 1D de la dynamique iode/xénon :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} C_I(z, t) = \gamma_I \Sigma_f \Phi(z, t) - \lambda_I C_I(z, t), \\ \frac{\partial}{\partial t} C_{Xe}(z, t) = \gamma_{Xe} \Sigma_f \Phi(z, t) + \lambda_I C_I(z, t) - (\lambda_{Xe} + \sigma_{Xe} \Phi(z, t)) C_{Xe}(z, t). \end{cases}$$

La variable z représente la coordonnée axiale et est mesurée à partir du centre du cœur 1D de hauteur H ($-H/2 \leq z \leq H/2$). On suppose que l'inconnue flux Φ remplit à chaque instant t la condition d'équilibre suivante :

$$D \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Phi(z, t) + \left[\frac{\nu \Sigma_f}{k} - \Sigma_a(z) \right] \Phi(z, t) - \sigma_{Xe} C_{Xe}(z, t) \Phi(z, t) - \alpha_F \bar{\Sigma}_a \Phi^2(z, t) = 0,$$

où le terme $\alpha_F \bar{\Sigma}_a \Phi^2(z, t)$ représente la contre-réaction, supposée immédiate, de la température.

A.3 Modèle point des déséquilibres axiaux

On suppose à présent que le flux Φ , le xénon C_{Xe} et l'iode C_I peuvent s'écrire sous la forme du produit d'une fonction constante en espace et en temps et d'une fonction de forme :

$$\begin{cases} \Phi(z, t) = \phi_0 \psi(z, t), \\ C_{Xe}(z, t) = X_0 x(z, t), \\ C_I(z, t) = I_0 y(z, t). \end{cases}$$

On obtient alors le système 1D flux-xénon-iode :

$$\begin{cases} D \frac{\partial^2 \psi(z, t)}{\partial z^2} + \left[\frac{\nu \Sigma_f}{k} - \Sigma_a(z) \right] \psi(z, t) - \sigma_{Xe} X_0 x(z, t) \psi(z, t) - \alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0 \psi^2(z, t) = 0, \\ \frac{\partial y(z, t)}{\partial t} = \left(\gamma_I \Sigma_f \frac{\phi_0}{I_0} \right) \psi(z, t) - \lambda_I y(z, t), \\ \frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \left(\gamma_{Xe} \Sigma_f \frac{\phi_0}{X_0} \right) \psi(z, t) + \left(\lambda_I \frac{\phi_0}{X_0} \right) y(z, t) - \lambda_{Xe} x(z, t) - (\sigma_{Xe} \phi_0) x(z, t) \psi(z, t). \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

L'expression des constantes ϕ_0 , X_0 et I_0 est obtenue un peu plus loin.

On développe à présent les variables ψ , x et y sur le mode fondamental et la première harmonique :

$$\begin{aligned} \psi(z, t) &= \cos(bz) + A(t) \sin(2bz), \\ x(z, t) &= \cos(bz) + B(t) \sin(2bz), \\ y(z, t) &= \cos(bz) + C(t) \sin(2bz). \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Pour passer à un modèle à deux points (bas et haut du cœur), on intègre les expressions précédentes sur les intervalles $[-H/2, 0]$ et $[0, H/2]$. Ainsi le flux moyenné de la moitié basse s'écrit :

$$\bar{\psi}_1(t) = \frac{\int_{-H/2}^0 \psi(z, t) dz}{\int_{-H/2}^0 dz} = \frac{2}{\pi} (1 - A(t)).$$

En procédant de même sur la partie haute, on a :

$$\bar{\psi}_2(t) = \frac{2}{\pi} (1 + A(t)).$$

On obtient de la même façon les égalités suivantes :

$$\begin{aligned} \bar{x}_1(t) &= \frac{2}{\pi} (1 - B(t)) \quad \text{et} \quad \bar{x}_2(t) = \frac{2}{\pi} (1 + B(t)), \\ \bar{y}_1(t) &= \frac{2}{\pi} (1 - C(t)) \quad \text{et} \quad \bar{y}_2(t) = \frac{2}{\pi} (1 + C(t)). \end{aligned}$$

En calculant le déséquilibre entre les parties haute et basse du cœur, normalisé par le flux moyen

$$\Delta \bar{\psi}(t) = \frac{\bar{\psi}_2(t) - \bar{\psi}_1(t)}{\bar{\psi}_1(t) + \bar{\psi}_2(t)},$$

on constate que

$$\Delta \bar{\psi}(t) = A(t).$$

Ainsi les coefficients $A(t)$, $B(t)$ et $C(t)$ représente en fait les déséquilibres axiaux normalisés du flux, du xénon et de l'iode. En reportant les développements (A.2) dans les équations de dynamiques 1D (A.1), on obtient ainsi un modèle point modélisant la dynamique des déséquilibres axiaux.

Expression du déséquilibre axial du flux A

On utilise la théorie des perturbations qui nous donne l'expression du rapport $\nu_c = \nu/k$ en fonction des flux directs ψ et flux adjoints ψ^* :

$$\nu_c(t) = \frac{\langle \psi^*, K\psi \rangle}{\langle \psi^*, \psi \rangle},$$

où l'opérateur K est défini par

$$K(\psi, x) = -\frac{D}{\Sigma_f} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\Sigma_a(z)}{\Sigma_f} + \frac{\sigma_{Xe} X_0}{\Sigma_f} x(z, t) + \frac{\alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0}{\Sigma_f} \psi(z, t).$$

Les flux ψ étant réels, les flux adjoints sont définis comme étant les transposés des flux directs. On développe ci-après le calcul de $\nu_c(t)$.

Calcul de $\langle \psi^*, \psi \rangle$: Par définition, on a

$$\psi(z, t) = \psi^*(z, t) = \cos(bz) + A(t) \sin(2bz).$$

Le produit scalaire $\langle \psi^*, \psi \rangle$ revient donc à intégrer sur toute la hauteur du cœur actif une fonction polynomiale :

$$\langle \psi^*, \psi \rangle = \int_{-H/2}^{H/2} (\cos(bz) + A(t) \sin(2bz)) (\cos(bz) + A(t) \sin(2bz)) dz,$$

ou encore

$$\langle \psi^*, \psi \rangle = \int_{-H/2}^{H/2} \cos^2(bz) dz + A^2(t) \int_{-H/2}^{H/2} \sin^2(2bz) dz + 2A(t) \int_{-H/2}^{H/2} \cos(bz) \sin(2bz) dz.$$

Le troisième terme correspondant à l'intégration d'une fonction impaire, il reste

$$\langle \psi^*, \psi \rangle = \int_{-H/2}^{H/2} \cos^2(bz) dz + A^2(t) \int_{-H/2}^{H/2} \sin^2(2bz) dz.$$

En se rappelant que $\cos^2(bz) = \frac{1+\cos(2bz)}{2}$ et $\sin^2(2bz) = \frac{1-\cos(4bz)}{2}$ et en remarquant que

$$\int_{-H/2}^{H/2} \cos(2bz) dz = \int_{-H/2}^{H/2} \cos(4bz) dz = 0,$$

on a alors

$$\langle \psi^*, \psi \rangle = \frac{H}{2} (1 + A^2(t)). \quad (\text{A.3})$$

Calcul de $\langle \psi^*, K\psi \rangle$: On a par définition :

$$\begin{aligned} \langle \psi^*, K\psi \rangle &= -\frac{D}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z, t) \cdot \psi(z, t) dz + \frac{1}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} \Sigma_a(z) \psi(z, t) \cdot \psi(z, t) dz \\ &+ \frac{\sigma_{Xe} X_0}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} x(z, t) \psi(z, t) \cdot \psi(z, t) dz + \frac{\alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} \psi(z, t) \psi(z, t) dz. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

- En utilisant les résultats d'intégration précédents, le premier terme s'écrit

$$\begin{aligned}
 -\frac{D}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z, t) \cdot \psi(z, t) dz &= \frac{D}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} (b^2 \cos(bz) + 4A(t)b^2 \sin(2bz)) \cdot (\cos(bz) + A(t)\sin(2bz)) dz, \\
 &= \frac{D}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} b^2 \cos^2(bz) + 4A(t)^2 b^2 \sin^2(2bz) dz, \\
 &= \frac{H}{2} \frac{D}{\Sigma_f} b^2 (1 + 4A(t)^2).
 \end{aligned}$$

- En remplaçant Σ_a par sa valeur dans les parties basse et haute du cœur, on obtient pour le second terme de (A.4) :

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} \Sigma_a(z) \psi(z, t) \cdot \psi(z, t) dz &= \frac{1}{\Sigma_f} \Sigma_{a1} \int_{-H/2}^0 \psi(z, t) \cdot \psi(z, t) dz + \frac{1}{\Sigma_f} \Sigma_{a2} \int_0^{H/2} \psi(z, t) \cdot \psi(z, t) dz, \\
 &= \frac{1}{\Sigma_f} \left\{ (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) \int_0^{H/2} (\cos^2(bz) + A^2(t) \sin^2(2bz)) dz \right. \\
 &\quad \left. - 2A(t) \Sigma_{a1} \int_0^{H/2} \cos(bz) \sin(2bz) dz + 2A(t) \Sigma_{a2} \int_0^{H/2} \cos(bz) \sin(2bz) dz \right\}.
 \end{aligned}$$

En utilisant le développement suivant $\cos(bz) \sin(2bz) = \frac{\sin(3bz) + \sin(bz)}{2}$, on obtient

$$\int_0^{H/2} \cos(bz) \sin(2bz) dz = \frac{4}{6b}.$$

En reportant cette valeur, on a donc

$$\frac{1}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} \Sigma_a(z) \psi(z, t) \cdot \psi(z, t) dz = \frac{H}{2} \frac{1}{\Sigma_f} \left[\frac{1}{2} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) + \frac{1}{2} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) A^2(t) + \frac{8}{3\pi} A(t) (-\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) \right].$$

- Le troisième terme se calcule comme suit :

$$\begin{aligned}
 \frac{\sigma_{Xe} X_0}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} x(z, t) \psi(z, t) \psi(z, t) dz &= \frac{\sigma_{Xe} X_0}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} (\cos(bz) + B(t) \sin(2bz)) \cdot (\cos(bz) + A(t) \sin(2bz))^2 dz, \\
 &= \frac{\sigma_{Xe} X_0}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} (\cos^3(bz) dz + (A^2(t) + 2A(t) \cdot B(t)) \cos(bz) \sin^2(2bz)) dz.
 \end{aligned}$$

En remarquant que $\cos^3(bz) = \frac{3\cos(bz) + \cos(3bz)}{4}$ et en utilisant le développement suivant

$$\cos(bz) \sin^2(2bz) = \frac{1}{2} \cos(bz) - \frac{1}{4} (\cos(3bz) + \cos(5bz)),$$

on a alors pour le troisième terme intégral de (A.4)

$$\begin{aligned}
 \frac{\sigma_{Xe} X_0}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} x(z, t) \psi(z, t) \psi(z, t) dz &= \frac{\sigma_{Xe} X_0}{\Sigma_f} \left[\frac{4}{3b} + \frac{16}{15b} (A^2(t) + 2A(t) \cdot B(t)) \right], \\
 &= \frac{H}{2} \frac{\sigma_{Xe} X_0}{\Sigma_f} \left[\frac{8}{3\pi} + \frac{32}{15\pi} (A^2(t) + 2A(t) \cdot B(t)) \right].
 \end{aligned}$$

- Enfin le dernier terme se simplifie en

$$\begin{aligned}
 \frac{\alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} \psi(z, t) \psi(z, t) \psi(z, t) dz &= \frac{\alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0}{\Sigma_f} \int_{-H/2}^{H/2} (\cos^3(bz) dz + 3A^2(t) \cos(bz) \sin^2(2bz)) dz \\
 &= \frac{\alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0}{\Sigma_f} \left[\frac{4}{3b} + 3 \frac{16}{15b} A^2(t) \right], \\
 &= \frac{H}{2} \frac{\alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0}{\Sigma_f} \left[\frac{8}{3\pi} + \frac{32}{15\pi} 3A^2(t) \right].
 \end{aligned}$$

On a donc

$$\begin{aligned} \langle \psi^*, K\psi \rangle = & \frac{H}{2} \frac{1}{\Sigma_f} [Db^2 (1 + 4A^2(t)) + \frac{1}{2} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) + \frac{8}{3\pi} (-\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) A(t) + \frac{1}{2} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) A^2(t) \\ & + \sigma_{Xe} X_0 \left(\frac{8}{3\pi} + \frac{32}{15\pi} (A^2(t) + 2A(t).B(t)) \right) + \alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0 \left(\frac{8}{3\pi} + \frac{32}{15\pi} 3A^2(t) \right)], \end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned} \langle \psi^*, K\psi \rangle = & \frac{H}{2} \frac{1}{\Sigma_f} \left\{ \left[4Db^2 + \frac{1}{2} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) + \frac{32}{15\pi} (\sigma_{Xe} X_0 + 3\alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0) \right] A^2(t) \right. \\ & \left. + \left[\frac{8}{3\pi} (-\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) + \frac{64}{15\pi} \sigma_{Xe} X_0 B(t) \right] A(t) + Db^2 + \frac{1}{2} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) + \frac{8}{3\pi} (\sigma_{Xe} X_0 + \alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0) \right\}. \end{aligned}$$

On obtient finalement une expression du type

$$\langle \psi^*, K\psi \rangle = \frac{H}{2} [\beta_1 A^2(t) + \beta_2 A(t) + \beta_3].$$

où

$$\begin{cases} \beta_1 = \frac{1}{\Sigma_f} \left(4Db^2 + \frac{1}{2} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) + \frac{32}{15\pi} (\sigma_{Xe} X_0 + 3\alpha_F \phi_0 \bar{\Sigma}_a) \right) \\ \beta_2(B) = \frac{1}{\Sigma_f} \left[\frac{8}{3\pi} (-\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) + \frac{64}{15\pi} \sigma_{Xe} X_0 B \right] \\ \beta_3 = \frac{1}{\Sigma_f} (Db^2 + \frac{1}{2} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) + (\frac{8}{3\pi}) (\sigma_{Xe} X_0 + \alpha_F \phi_0 \bar{\Sigma}_a)) \end{cases}$$

Calcul de ν_c : On obtient alors :

$$\nu_c(t) = \frac{\langle \psi^*, K\psi \rangle}{\langle \psi^*, \psi \rangle} = \frac{\beta_1 A^2(t) + \beta_2 A(t) + \beta_3}{1 + A^2(t)}.$$

Expression de A : On cherche le déséquilibre $A(t)$ tel que le système soit le plus proche possible de la criticité, i.e. tel que le rapport $\nu_c(t)$ soit minimal. On cherche donc A tel que :

$$\frac{d}{dA} \nu_c(A) = \frac{-\beta_2 A^2 + 2(\beta_1 - \beta_3)A + \beta_2}{(A^2 + 1)^2} = 0.$$

Cette contrainte nous donne

$$A(t, B) = \frac{(\beta_1 - \beta_3) - \sqrt{(\beta_1 - \beta_3)^2 + \beta_2^2}}{\beta_2(B)} = \frac{(\beta_1 - \beta_3) - \Delta}{\beta_2(B)},$$

où $\Delta = \sqrt{(\beta_1 - \beta_3)^2 + \beta_2^2}$.

Modèle non linéaire pour les déséquilibres axiaux de xénon B et d'iode C

On intègre les équations de xénon et d'iode du système (A.1) sur les deux moitiés du cœur, on obtient :

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{y}_i(z, t)}{\partial t} = \left(\gamma_I \Sigma_f \frac{\phi_0}{I_0} \right) \bar{\psi}_i(z, t) - \lambda_I \bar{y}_i(z, t), \\ \frac{\partial \bar{x}_i(z, t)}{\partial t} = \left(\gamma_{Xe} \Sigma_f \frac{\phi_0}{X_0} \right) \bar{\psi}_i(z, t) + \left(\lambda_I \frac{I_0}{X_0} \right) \bar{y}_i(z, t) - \lambda_{Xe} \bar{x}_i(z, t) - (\sigma_{Xe} \phi_0) \frac{\int_{moitié i} x(z, t) \psi(z, t) dz}{\int_{moitié i} dz}, \end{cases} \quad (A.5)$$

où i désigne la partie basse ($i = 1$) ou haute ($i = 2$) du cœur. En reportant les expressions des ψ_1 , x_1 et y_1 donnés en fonction des amplitudes A , B et C sur la partie basse du cœur, on trouve

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} C(t) = \left(\gamma_I \Sigma_f \frac{\phi_0}{I_0} \right) C(t) - \lambda_I C(t) - \left[\gamma_I \Sigma_f \frac{\phi_0}{I_0} - \lambda_I \right], \\ \frac{d}{dt} B(t) = \left(\gamma_{Xe} \Sigma_f \frac{\phi_0}{X_0} \right) B(t) + \left(\lambda_I \frac{I_0}{X_0} \right) C(t) - \lambda_{Xe} B(t) + \frac{\pi}{2} (\sigma_{Xe} \phi_0) \frac{\int_{-H/2}^0 x(z, t) \psi(z, t) dz}{\int_{-H/2}^0 dz}, \\ - \left[\gamma_{Xe} \Sigma_f \frac{\phi_0}{X_0} + \lambda_I \frac{\phi_0}{X_0} - \lambda_{Xe} \right]. \end{cases} \quad (A.6)$$

Le terme intégral en $x\psi$ se calcule de la manière suivante

$$\begin{aligned} \int_{-H/2}^0 x(z, t) \psi(z, t) dz &= \int_{-H/2}^0 (\cos(bz) + B(t) \sin(2bz)) \cdot (\cos(bz) + A(t) \sin(2bz)) dz, \\ &= \int_{-H/2}^0 \cos^2(bz) dz + (A + B)(t) \int_{-H/2}^0 \cos(bz) \sin(2bz) dz + (A.B)(t) \int_{-H/2}^0 \sin^2(2bz) dz, \\ &= \frac{1}{2} \int_{-H/2}^0 (1 + \cos(2bz)) dz \\ &\quad + \frac{1}{2} (A + B)(t) \int_{-H/2}^0 (\sin(3bz) + \sin(bz)) dz + \frac{(A.B)(t)}{2} \int_{-H/2}^0 (1 - \cos(4bz)) dz, \\ &= \frac{H}{4} - \frac{2}{3b} (A(t) + B(t)) + \frac{H}{4} (A.B)(t), \\ &= \frac{H}{2} \left(\frac{1}{2} + \frac{4}{3\pi} (A + B)(t) \right) + \frac{1}{2} (A.B)(t). \end{aligned}$$

On a alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} B(t) &= \left(\gamma_{Xe} \Sigma_f \frac{\phi_0}{X_0} \right) B(t) + \left(\lambda_I \frac{I_0}{X_0} \right) C(t) - \lambda_{Xe} B(t) + \frac{\pi}{2} \sigma_{Xe} \phi_0 \left(\frac{4}{3\pi} (A + B)(t) + \frac{1}{2} (A.B)(t) \right), \\ &\quad - \left[\gamma_{Xe} \Sigma_f \frac{\phi_0}{X_0} + \lambda_I \frac{I_0}{X_0} - \lambda_{Xe} - \frac{\pi}{4} \sigma_{Xe} \phi_0 \right]. \end{aligned}$$

On pose

$$\begin{cases} \gamma_I \Sigma_f \frac{\phi_0}{I_0} - \lambda_I = 0, \\ \gamma_{Xe} \Sigma_f \frac{\phi_0}{X_0} + \lambda_I \frac{I_0}{X_0} - \lambda_{Xe} - \frac{\pi}{4} \sigma_{Xe} \phi_0 = 0, \end{cases}$$

ce qui nous donne l'expression des constantes I_0 et X_0 :

$$\begin{cases} I_0 = \frac{\gamma_I \Sigma_f \phi_0}{\lambda_I}, \\ X_0 = \frac{(\gamma_I + \gamma_{Xe}) \Sigma_f \phi_0}{\lambda_{Xe} + (\pi/4) \sigma_{Xe} \phi_0}. \end{cases}$$

La dynamique des déséquilibres axiaux de xénon B et d'iode C est alors donnée par la formule

$$\frac{d(B, C)}{dt} = \mathcal{F}(B, C),$$

où l'opérateur non linéaire \mathcal{F} est défini par

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_1(B, C) &= \gamma_{Xe} \Sigma_f \frac{\phi_0}{X_0} A(B) + \frac{\lambda_I I_0}{X_0} C - \lambda_{Xe} B - \sigma_{Xe} \phi_0 \left[\frac{2}{3} (A(B) + B) + \frac{\pi}{4} A(B).B \right], \\ \mathcal{F}_2(B, C) &= \gamma_I \Sigma_f \frac{\phi_0}{I_0} A(B) - \lambda_I C. \end{aligned}$$

Calcul de ϕ_0 : La solution stationnaire ϕ_c est donnée par

$$\phi_c(z) = \phi_0 \cos(bz).$$

On obtient la constante ϕ_0 à partir du flux stationnaire ϕ_c grâce à la relation suivante :

$$P = \int_{-H/2}^{H/2} \kappa \Sigma_f \phi_c(z) dz = \int_{-H/2}^{H/2} \kappa \Sigma_f \phi_0 \cos(bz) dz,$$

où P désigne la puissance totale dégagée (en W) dans le réacteur et κ l'énergie dégagée par fission (en J). Cela nous donne

$$\phi_0 = \frac{(\pi/2)P}{\kappa \Sigma_f H}.$$

Calcul de Σ_{a0} : La solution stationnaire ϕ_c est solution de l'équation à l'équilibre

$$D \frac{d^2}{dz^2} \phi_c(z) + (\nu \Sigma_f - \Sigma_a(z)) \phi_c(z, t) - \sigma_{Xe} X_0(z) \phi_c(z) - \alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_c^2(z) = 0.$$

En introduisant l'expression de ϕ_c et en intégrant sur la hauteur du cœur, on obtient

$$-2Db\phi_0 + \frac{2}{b} \nu \Sigma_f \phi_0 - \frac{\phi_0}{b} (\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}) - \frac{H}{2} (\sigma_{Xe} X_0 \phi_0 + \alpha_F \bar{\Sigma}_a \phi_0^2) = 0$$

en notant que $\int_{-H/2}^{H/2} \cos(bz) dz = \frac{2}{b}$ et $\int_{-H/2}^{H/2} \cos^2(bz) dz = \frac{H}{2}$. Par définition à l'équilibre

$$\Sigma_{a0} \equiv \bar{\Sigma}_a \equiv \frac{\Sigma_{a1} + \Sigma_{a2}}{2}.$$

On a donc

$$-2Db + \frac{2}{b} \nu \Sigma_f \phi_0 - \frac{2\phi_0}{b} \Sigma_{a0} - \frac{H}{2} (\sigma_{Xe} X_0 \phi_0 + \alpha_F \Sigma_{a0} \phi_0^2) = 0$$

qui donne après simplification

$$\Sigma_{a0} = \frac{\nu \Sigma_f - (\pi/4) \sigma_{Xe} X_0 - Db^2}{1 + (\pi/4) \alpha_F \phi_0}.$$

En dehors de l'équilibre, les variables Σ_{a1} et Σ_{a2} sont obtenues par variation de la section d'absorption à l'équilibre Σ_{a0} :

$$\begin{aligned} \Sigma_{a1} &= \Sigma_{a0} (1 - 0.01 \Delta \Sigma_a), \\ \Sigma_{a2} &= \Sigma_{a0} (1 + 0.01 \Delta \Sigma_a), \end{aligned}$$

où $\Delta \Sigma_a$ représente la variation (en %) de la valeur de la section d'absorption à l'équilibre.

Données

On donne dans le tableau A.1 les valeurs des constantes apparaissant dans le modèle de dynamique des oscillations xénon et proposées dans [One78].

H	365.8 cm	hauteur du réacteur
γ_{Xe}	0.003	rendement de fission du xénon
σ_{Xe}	$2.72 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$	section microscopique d'absorption du xénon 135
λ_{Xe}	$2.09 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	constante de désintégration de l'iode 135
γ_I	0.061	rendement de fission de l'iode 135
λ_I	$2.87 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	constante de désintégration de l'iode 135
D	0.395 cm	coefficient de diffusion
Σ_f	0.64 cm^{-1}	section efficace de fission
$\nu\Sigma_f$	1.56 cm^{-1}	section efficace de production
α_F	3.64×10^{-16}	constante de contre-réaction thermique
$\Delta\Sigma_a$	0.18%	variation d'absorption par rapport à l'équilibre

TAB. A.1. Données du modèle d'Onega et Kisner.

Les conditions initiales du système de dynamique correspondent à la situation à l'équilibre, on a donc :

$$\begin{aligned} B(t=0) &= 0, \\ C(t=0) &= 0. \end{aligned}$$

A.4 Exemple

Pour conclure, on propose dans la figure A.1 un exemple de simulation d'un axial offset de puissance avec ce modèle d'Onega et Kisner. Cette simulation a été obtenue avec une implémentation en Python du modèle. Les caractéristiques de ce calcul sont données dans le tableau A.2.

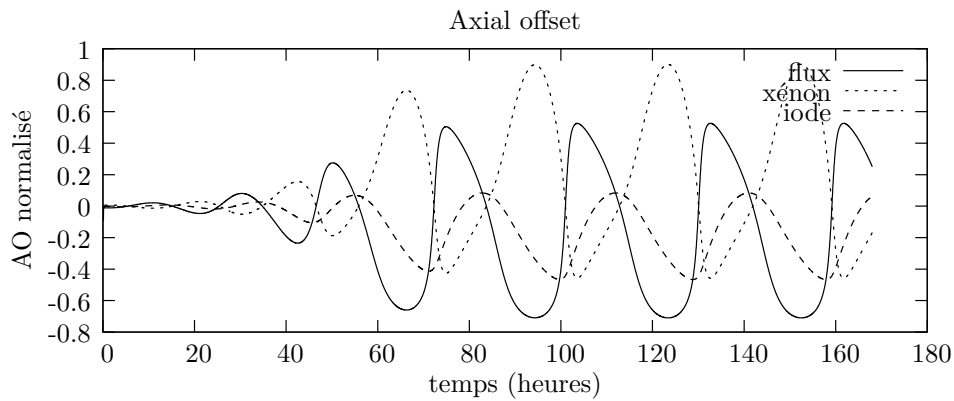


FIG. A.1. Dynamique des axial offsets normalisés de flux, xénon et iode sur une période d'environ 1 semaine.

Σ_{a0}	1.4 cm^{-1}	section d'absorption moyenne
T_f	604800 s	temps final de la simulation
Δt	100 s	pas de temps d'intégration
B_0	0	condition initiale de B
C_0	0	condition initiale de C
$\Delta \Sigma_a$	0.12%	variation d'absorption par rapport à l'équilibre
$\Delta pulse$	500 s	durée du pulse
α_F	1.7×10^{-16}	constante de contre-réaction thermique
ϕ_0	10^{14}	constante

TAB. A.2. Données de la simulation différant de celles de Onega et Kisner.

B

Valeurs numériques des différentes constantes physiques employées dans CIREP1D

TAB. B.1. *Caractéristiques géométriques (REP 1300 MWe)*

H	hauteur du cœur (sans réflecteur)	4.27 m
e_{refl}	épaisseur des réflecteurs inférieur et supérieur	1.42 m
$V_{cœur}$	volume total d'eau en cœur	20.45 m ³
N_{ass}	nombre d'assemblages	193
\mathcal{A}	section de l'assemblage	21.504 ² cm ²
$N_{crayons}$	nombre de crayons	264
r_{comb}	rayon du crayon combustible	4.75 mm

TAB. B.2. *Caractéristiques neutroniques*

D_1	coefficient de diffusion du groupe rapide pour le réflecteur	1.4 cm
D_2	coefficient de diffusion du groupe lent pour le réflecteur	0.4 cm
Σ_{a1}	section d'absorption du groupe rapide pour le réflecteur	0.10171 cm ⁻¹
Σ_{a2}	section d'absorption du groupe lent pour le réflecteur	0.817379 cm ⁻¹
λ_{Xe}	constante de décroissance radioactive du xénon	2.1×10^{-5} s ⁻¹
λ_I	constante de décroissance radioactive de l'iode	2.93×10^{-5} s ⁻¹
γ_{Xe}	rendement de fission du xénon	0.38×10^{-2}
γ_I	rendement de fission de l'iode	6.4×10^{-2}
α	terme de correction de l'absorption supplémentaire due aux grappes	2%

TAB. B.3. *Caractéristiques thermohydrauliques*

P	puissance totale du réacteur à l'équilibre	3800 MW
Q	débit volumique	27.15 m ³ .s ⁻¹
$T_{in,cœur}$	température de l'eau en entrée du cœur (à l'équilibre)	291.1 °C
N_{canal}	nombre de canaux de thermohydraulique	50952

C

Exemple de différentiation avec TAPENADE

Dans le chapitre 3, on a proposé un retour d'expérience sur la différentiation automatique du code CIREP1D à l'aide de l'outil TAPENADE développé à l'INRIA [Tap04]. Le principal reproche que l'on peut adresser à TAPENADE est le manque de lisibilité des codes produits notamment le code adjoint. Pour illustrer ces propos, on présente un exemple de code source différentié par TAPENADE. Il s'agit d'une fonction qui calcule la somme S des éléments d'un tableau T jusqu'à ce que cette somme atteigne la valeur 100.

```
subroutine somme(T,S)

  implicit none

  ! En entr\'ee : tableau T de taille 5
  double precision, dimension(5), intent(in) :: T
  ! En sortie : un r\'eel S
  double precision, intent(out) :: S

  ! Variable locale
  integer :: i ! indice de boucle

  ! Initialisation
  S = 0.d0
  i = 1

  ! Boucle
  do while( S < 100.d0 .and. i < 6 )
    S = S + T(i)
    i = i + 1
  end do
  ! Fin de la boucle

end subroutine somme
```

On donne ci-après le code adjoint produit par TAPENADE. On constate que les commentaires ont été déplacés ou parfois ont disparu. Par ailleurs l'instruction inverse est difficile à relire.

```
SUBROUTINE SOMME_B(t, tb, s, sb)
  IMPLICIT NONE
  DOUBLE PRECISION, INTENT(OUT) :: s
  DOUBLE PRECISION :: sb
  DOUBLE PRECISION, DIMENSION(5), INTENT(IN) :: t
  DOUBLE PRECISION :: tb(5)
  INTEGER :: ad_count, i, i0
! En entr'ee : tableau T de taille 5
! En sortie : un r'eel S
! Variable locale
! indice de boucle
! Initialisation
  s = 0.d0
  i = 1
  ad_count = 0
! Boucle
  DO WHILE (s .LT. 100.d0 .AND. i .LT. 6)
    s = s + t(i)
    CALL PUSHINTEGER4(i)
    i = i + 1
    ad_count = ad_count + 1
  END DO
  CALL PUSHINTEGER4(ad_count)
  tb(1:5) = 0.D0
  CALL POPINTEGER4(ad_count)
  DO i0=1, ad_count
    CALL POPINTEGER4(i)
    tb(i) = tb(i) + sb
  END DO
  sb = 0.D0
END SUBROUTINE SOMME_B
```

On peut comparer ce code généré automatiquement avec le code adjoint équivalent en fonction mais plus lisible et plus performant (moins de boucles et de variables stockées).

```
subroutine somme_b(T,Tb,S,Sb)

  implicit none

  ! En entr'ee : tableau T de taille 5
  double precision, dimension(5), intent(in) :: T
  double precision, intent(in) :: Sb
  ! En sortie : un r'eel S
  double precision, dimension(5), intent(out) :: Tb
  double precision, intent(out) :: S
```

```
! Variable locale
integer :: i ! indice de boucle

! Initialisation
S = 0.d0
i = 1

! Boucle
do while( S < 100.d0 .and. i < 6 )
    S = S + T(i)
    Tb(i) = Tb(i) + Sb
    i = i + 1
end do
! Fin de la boucle
Sb = 0.d0

end subroutine somme
```


Liste des tableaux

1.1	Caractéristiques des REP.	11
1.2	Valeurs type des grandeurs physiques de la dynamique xénon 135 [Pet03].	25
3.1	Valeurs par défaut des constantes neutroniques pour le milieu réflecteur (les autres constantes neutroniques sont mises à zéro).	67
3.2	Consignes d'insertion du groupe de régulation pour COCCINELLE et CIREP1D. Les pas d'insertion sont au nombre de 260.	85
3.3	Caractéristiques du transitoire de la simulation A.	91
5.1	Effets de la variation de la constante c_2 du critère de Wolfe sur la minimisation du troisième cas test. La constante c_1 est fixée à 10^{-4} . Les indications de nombre d'itérations et d'évaluations sont données pour une réduction de 1% de la fonction coût	132
7.1	Consignes d'insertion de grappes pour les transitoires de référence et d'ébauche. Elles ne diffèrent que pendant la perte du KIT entre $t=2010$ et $t=83280$ secondes. La puissance est maintenue à 3040 MW pendant toute la durée de l'expérience.	173
8.1	Consignes de puissance et d'insertion de grappes du transitoire simulé.	194
8.2	Comparaison des temps calculs requis pour différentes expériences d'assimilation où l'on a fait varier la taille de la fenêtre d'assimilation (de 1 heure à 4 heures). La fréquence des observations est de 1 heure. La minimisation est réalisée avec l'algorithme BFGS avec un critère d'arrêt de 10^{-4} sur la norme du gradient. Pour information, la machine ayant servi aux calculs est un portable DELL precision M65 doté d'un processeur Intel Core 2 1.66GHz.	200
A.1	Données du modèle d'Onega et Kisner.	226
A.2	Données de la simulation différant de celles de Onega et Kisner.	227
B.1	Caractéristiques géométriques (REP 1300 MWe)	229
B.2	Caractéristiques neutroniques	229
B.3	Caractéristiques thermohydrauliques	229

Liste des figures

1.1	Principe d'un Réacteur à Eau Pressurisée avec aéroréfrigérant. Source : http ://www.hellfirez.de/web/referate/inhalte/Physik_Energie.htm . Auteur : Steffen Kuntoff, licence CC-BY.	9
1.2	Évolution d'une réaction en chaîne à partir d'un nombre N_0 de neutrons	10
1.3	Coupe horizontale 2D d'un cœur 900 MWe.	12
1.4	Assemblage et ses crayons.	13
1.5	Schéma de formation et de disparition de l'iode 135 et du xénon 135	23
1.6	Schéma <i>simplifié</i> de formation et de disparition de l'iode 135 et du xénon 135.	24
1.7	Évolution de l'iode 135 et du xénon 135 dans un réacteur après arrêt.	26
1.8	Dynamique des déséquilibres axiaux (axial offsets) de puissance, iode 135 et xénon 135.	27
2.1	Allure d'une densité de probabilité et niveau de confiance	36
2.2	Illustration en 1D de la relation entre la convexité de \mathcal{J}_{4DVAR} et la densité de probabilité de l'analyse.	47
2.3	Illustration du principe de fonctionnement des méthodes incrémentales.	48
2.4	Exemples de trajectoires calculées par les méthodes variationnelles 3DVAR et 4DVAR et le filtre de Kalman	50
3.1	Discrétisation du canal et du crayon combustible : seule la température combustible est discrétisée sur un maillage 2D du crayon ; les autres variables sont discrétisées aux nœuds du maillage 1D du canal.	64
3.2	Influence du réflecteur radial sur la forme du flux dans la partie active du cœur.	66
3.3	Discrétisation radiale régulière de la pastille combustible. <i>Le gap et la gaine ne sont pas discrétisés</i> dans le code CIREP1D.	70
3.4	Approximation des paramètres $C_{p,mod}$ et ρ_{mod} par des corrélations. La pression est de 155 bar.	72
3.5	Couplage entre les modules de CIREP1D.	77
3.6	Problèmes imbriqués de la modélisation de la dynamique xénon.	79
3.7	Température axiale du modérateur calculée d'une part par COCCINELLE (discrétisation sur 38 mailles) et d'autre part par CIREP1D (discrétisation sur 30 mailles). Le calcul est réalisé à 80% PN.	81
3.8	Profils axiaux d'irradiation de COCCINELLE (sur 38 mailles) et de CIREP1D (sur 30 mailles) utilisés pour la comparaison du transitoire xénon. L'irradiation moyenne cœur est de 29161 MWjour/t pour COCCINELLE et de 29159 MWjour/t pour CIREP1D	83

3.9	Profils 1D de puissance et de xénon calculés par COCCINELLE et CIREP1D en statique à 80% PN et avec des grappes insérées de 22.98 cm dans le cœur.	84
3.10	Axial offset de puissance et xénon pour les codes COCCINELLE et CIREP1D pour le transitoire décrit dans le tableau 3.2.	85
3.11	Profils 1D de puissance et de xénon calculés par COCCINELLE et CIREP1D au temps final (T=120 heures) de la simulation du transitoire xénon.	86
3.12	Champs 1D de xénon et d'iode calculés par CIREP1D pour la simulation A. Les oscillations s'amortissent au cours du temps.	92
3.13	Déséquilibre axial du xénon calculé par CIREP1D pour la simulation A.	92
3.14	Champs 1D de xénon et d'iode calculés par CIREP1D pour la simulation B. Les oscillations se succèdent et s'amplifient au cours du temps.	93
3.15	Axial offset de xénon calculé par CIREP1D pour la simulation B.	94
3.16	Champs 1D de xénon et d'iode calculés par CIREP1D pour la simulation C. On distingue le pic xénon au temps $T = 12h$. La concentration d'iode, elle, ne cesse de baisser à partir de la chute des grappes.	95
3.17	Concentrations de xénon et d'iode calculés par CIREP1D pour la simulation C dans une maille située dans la moitié inférieure du cœur. Le pic xénon est atteint environ 8 heures après l'arrêt d'urgence puis le niveau de xénon revient à son niveau d'équilibre au bout d'une journée environ pour être nul au bout de quelques jours.	95
4.1	Profil d'irradiation et profil du xénon calculé à saturation. Lorsque les grilles de maintien du combustible sont prises en compte dans le profil d'irradiation (irradiation moins élevée du combustible du fait de l'absorption d'une partie des neutrons par les grilles), elles font apparaître des irrégularités dans le profil de puissance et donc dans celui du xénon.	100
4.2	Représentation des concentrations axiales de xénon et d'iode par des bases de sinus. Le profil axial d'iode peut être développé sur une base plus petite que le profil axial de xénon du fait d'une moins grande sensibilité des constantes neutroniques de l'iode à la présence des grilles	101
4.3	Fonction de corrélation de Balgovind en fonction de z_i et de L	105
4.4	Valeurs des éléments de la matrice de corrélation $\mathbf{\Gamma}_{Xe}$ pour différents choix du paramètre L	106
4.5	Structure de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} en fonction de l'échelle de corrélation L . Sont représentés en noir les éléments de \mathbf{B} supérieurs à 10^{-8}	106
4.6	Conditionnement de la matrice d'ébauche \mathbf{B} en fonction de l'échelle de corrélation L	107
4.7	Construction de l'état d'ébauche avec CIREP1D à partir d'un état à saturation en t_{-m} et d'un terme de forçage $\tilde{\mathbf{u}}$	108
4.8	Construction du terme d'ébauche et des observations dans le cadre des expériences jumelles : on part d'un état initial à saturation (temps t_{-m}) et on définit deux trajectoires distinctes en considérant deux termes de forçage différents (u pour la trajectoire de référence et \tilde{u} pour la trajectoire ébauche). Au temps t_0 , on obtient deux états différents dont l'un constitue la référence \mathbf{X}^t et l'autre le terme d'ébauche \mathbf{X}^b au temps t_0 . Les observations du système sont obtenues sur la période $[t_0; t_n]$ à partir de la trajectoire issue de l'état vrai \mathbf{X}^t en bruitant ou non les données (dans cette représentation schématique, les observations sont de même nature que le vecteur d'état).	109

4.9	Erreur relative de l'analyse de xénon et d'iode. Les observations sont exactes. Il n'y a pas de prise en compte de terme d'ébauche.	111
4.10	Erreur relative de l'analyse de xénon et d'iode. Les observations sont exactes, l'ébauche est prise égale à l'état initial vrai. Il n'y a pas de prise en compte des corrélations spatiales dans la matrice \mathbf{B}	112
4.11	Incréments pour les concentrations initiales de xénon et d'iode au cours de la minimisation (convergence en 10 itérations avec l'algorithme LBFGS). Les observations sont exactes, l'ébauche est prise égale à l'état initial vrai. L'incrément exact est donc nul. Il n'y a pas de prise en compte des corrélations spatiales dans la matrice \mathbf{B}	112
4.12	Incréments d'analyse en fonction du bruit introduit dans les observations : 0% correspond à des observations exactes, 0.5% correspond à un bruitage des observations de l'ordre de 0.5% et le troisième cas correspond à un bruitage de 30% sur les mesures de puissance intégrée, de 10% sur les mesures de l'axial offset puissance et de 1% sur les concentrations en bore.	113
5.1	Évolution en fonction du scalaire α , de l'erreur ϵ de linéarisation pour le modèle (décomposée en erreur xénon et erreur iode) et pour l'opérateur d'observation (ici représentées, l'erreur sur la puissance intégrée et la concentration en bore). . . .	118
5.2	Évolution des erreurs de linéarisation en fonction de l'intervalle de temps intégré par le modèle. On a décomposé l'erreur modèle en erreur xénon et erreur iode. Le pas de linéarisation α est de l'ordre de 2.5×10^{-2}	118
5.3	Tracé de la fonction scalaire $\phi(\alpha)$. L'ébauche est prépondérante dans la fonction coût. Le minimum de ϕ est proche de celui de la fonction quadratique $J^b(\mathbf{X}) + \mathcal{J}^{obs}(\mathbf{X}_k)$	119
5.4	Tracé de la fonction scalaire $\phi(\alpha)$. Les observations sont prépondérantes dans la fonction coût. Le minimum de ϕ ne correspond pas à celui de la fonction quadratique $J^b(\mathbf{X}) + \mathcal{J}^{obs}(\mathbf{X}_k)$	120
5.5	Conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} au point \mathbf{X}^b en fonction de la taille de la fenêtre d'assimilation et pour trois transitoires (décrits respectivement dans les chapitres 6, 7 et 8). Seulement deux séries d'observation sont prises en compte dans la fenêtre.	122
5.6	Conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} au point \mathbf{X}^b en fonction du nombre d'observations. La fenêtre d'assimilation est de 6 heures. Le transitoire est décrit au chapitre 8.	122
5.7	Conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} au point \mathbf{X}^b en fonction de la confiance accordée aux observations (paramètre $\sigma_{\mathbf{R}}$). La matrice \mathbf{B} est par ailleurs fixée. Le transitoire modélisé est décrit au chapitre 7.	122
5.8	Conditionnement de la matrice hessienne de \mathcal{J} aux points \mathbf{X}^b et \mathbf{U}^b en fonction du nombre de temps d'observation. La fenêtre d'assimilation est de 18 heures. Le transitoire et les matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} sont décrits au chapitre 7.	124
5.9	Distribution du spectre de la matrice $\nabla^2 \mathcal{J}(\mathbf{U}^b)$ en fonction du nombre de séries d'observation. Pour chaque série, on a fait figurer les 60 valeurs propres de la matrice. Les plus petites valeurs propres sont confondues dans cette figure. La fenêtre d'assimilation est de 18 heures. Le transitoire est décrit au chapitre 7. . .	124

5.10	Évolution du gradient de la fonction coût au cours de la minimisation. Il s'agit du schéma sans terme d'ébauche et avec observations exactes présenté page 110. Les vecteurs gradient ont été multipliés par des puissances de 10 (voir légende) pour améliorer la lisibilité.	125
5.11	Diminution de la fonction coût et du gradient au cours des itérations de minimisation avec l'algorithme du gradient non linéaire. Le premier cas test converge en 7 itérations et le second cas test, en 57 itérations. La méthode de descente est celle de Polak-Ribière et les constantes du critère de Wolfe sont fixées à $c_1 = 10^{-4}$ et $c_2 = 0.1$	131
5.12	Influence du calcul de la direction de descente lors de la minimisation du troisième cas test. (FR), (PR) désignent respectivement les méthodes de Fletcher-Reeves, Polak-Ribière.	131
5.13	Diminution de la fonction coût et de son gradient au cours des itérations de minimisation avec l'algorithme LBFGS ($m = 15$ et $c_2 = 0.9$). Le premier cas test converge en 7 itérations et le second cas test en 19 itérations.	134
5.14	Cas test 3 : diminution de la fonction coût et de la norme du gradient au cours des itérations de minimisation avec l'algorithme LBFGS ($m = 15$ et $c_2 = 0.9$)	134
5.15	Influence de l'entier m sur la convergence de la fonction coût avec l'algorithme LBFGS pour le cas test 3.	135
5.16	Nombre d'itérations et d'appels à \mathcal{J} requis en fonction de la constante c_2 pour la convergence de l'algorithme LBFGS (cas test 2).	136
5.17	Influence du paramètre c_2 sur la convergence de la fonction coût avec l'algorithme LBFGS (cas test 2).	136
5.18	Diminution de la fonction coût et de son gradient au cours des itérations de minimisation avec l'algorithme de Gauss-Newton exact. Les deux cas tests convergent en 4 itérations.	139
5.19	Évolution de la fonction coût du cas test 3 et norme de son gradient au cours des itérations de l'algorithme de Levenberg-Marquardt exact. Le paramètre λ introduit dans la direction de descente est initialisé à 1. On a choisi un facteur de réduction/accroissement α égal à 2.	139
6.1	Concentrations initiales des simulations <i>si</i> et <i>sii</i>	146
6.2	Axial offset de puissance et xénon des deux simulations (on rappelle que l'axial offset de puissance est la différence des puissances produites dans les moitiés supérieure et inférieure du cœur rapportée à la puissance totale dégagée par le réacteur $\frac{PH-PB}{PH+PB}$). Le cœur est en fin de cycle.	147
6.3	Évolution de la concentration en bore critique pour les deux simulations. Le cœur est en fin de cycle.	147
6.4	Norme euclidienne (norme L^2) des écarts xénon $\ abs(C_{Xe}^{si}(z) - C_{Xe}^{sii}(z)) / C_{Xe}^{si}(z)\ _2$ et iode $\ abs(C_I^{si}(z) - C_I^{sii}(z)) / C_I^{si}(z)\ _2$ en valeur absolue entre les simulations <i>si</i> et <i>sii</i> . Le cœur est en fin de cycle.	148
6.5	Axial offset de puissance pour les deux simulations dans le cas du cœur en milieu de vie : le régime est à présent amorti.	149
6.6	Norme euclidienne (norme L^2) des écarts xénon $\ abs(C_{Xe}^{si}(z) - C_{Xe}^{aii}(z)) / C_{Xe}^{si}(z)\ _2$ et iode $\ abs(C_I^{si}(z) - C_I^{aii}(z)) / C_I^{si}(z)\ _2$ en valeur absolue entre les simulations <i>si</i> et <i>sii</i> . Le cœur est en milieu de cycle.	149
6.7	Concentrations initiales des simulations <i>ai</i> et <i>aii</i> . Les concentrations initiales de xénon sont identiques.	150

6.8	Axial offset de xénon des simulations <i>ai</i> et <i>aii</i>	151
6.9	Sur un intervalle de 30 heures, norme euclidienne (norme L^2) des écarts xénon $\ abs(C_{Xe}^{ai}(z) - C_{Xe}^{aii}(z)) / C_{Xe}^{ai}(z)\ _2$ et iode $\ abs(C_I^{ai}(z) - C_I^{aii}(z)) / C_I^{ai}(z)\ _2$ en valeur absolue, entre les deux calculs <i>ai</i> et <i>aii</i> . On a reporté sur les figures les temps de demi-vie de l'iode et du xénon ($T = \ln(2)/\lambda$).	151
6.10	Évolution pour différents temps d'une perturbation locale sur l'état initial. La perturbation initiale d'une valeur de 20% s'applique sur la 7ème composante des vecteurs concentrations 1D de xénon et d'iode. Le transitoire modélisé correspond à un régime oscillatoire divergent.	152
6.11	Évolution spatiale à trois temps (0h, 3h15 et 14h) d'une perturbation locale appliquée à l'état initial. Au fil du temps, la perturbation perd en intensité et en même temps se propage aux autres composantes du vecteur d'état. Le transitoire modélisé correspond à un régime oscillatoire divergent.	152
6.12	Incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus par assimilation de 30 mesures exactes du champ 1D de puissance combustible pour 2 temps d'observation dans le premier cas (système déterminé) et pour 6 temps d'observation dans le second cas (système sur-déterminé). La fenêtre d'assimilation est de 3 heures. L'ébauche n'est pas prise en compte dans la fonction coût.	155
6.13	Incréments de xénon et d'iode au temps initial t_0 en fonction du nombre de temps d'observation. On constate que les incréments d'analyse sont quasi confondus. Les variables assimilées par temps d'observation sont les 6 mesures exactes de puissance intégrée. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures. L'ébauche n'est pas prise en compte dans la fonction coût.	155
6.14	Profil 1D de puissance de référence au temps t_0 (en pointillé) et observations (puissance intégrée) utilisées dans l'assimilation (en trait plein).	156
6.15	Concentrations en bore critique de référence et analysées. L'expérience porte sur l'assimilation de 6 mesures exactes de puissance intégrée pour 8 temps d'observation. La taille de la fenêtre est de 3 heures.	156
6.16	Concentrations en bore issues de deux schémas d'assimilation au cours du temps. Dans le premier, seules sont assimilées les mesures de puissance intégrée (légende 6P). Dans le second schéma, on assimile une mesure de concentration en bore en plus des 6 mesures de puissance (légende 6P+1B). Dans les deux cas, la taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et comporte 8 séries d'observation régulièrement espacées. Les mesures sont bruitées.	157
6.17	Profils 1D de xénon et de puissance issues des deux schémas d'assimilation. Dans le premier, seules sont assimilées les mesures de puissance intégrée (légende 6P). Dans le second schéma, on assimile une mesure de concentration en bore en plus des 6 mesures de puissance (légende 6P+1B).	158
6.18	Axial offset de puissance analysé. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8 temps d'observation sont considérés. Dans la première expérience (légende 6P), seules les mesures de puissance intégrée sont assimilées. Dans la seconde (légende 6P+1B), on assimile de plus 1 mesure de concentration en bore. Dans la dernière expérience (légende 6P+1B+1AO), on assimile à chaque temps d'observation, les 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure de concentration en bore et 1 mesure de l'axial offset de puissance.	159

6.19	Incréments d'analyse de xénon et d'iode. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8 temps d'observation sont considérés. Dans la première expérience (légende 6P), seules les mesures de puissance intégrée sont assimilées. Dans la seconde (légende 6P+1B), on assimile de plus 1 mesure de concentration en bore. Dans la dernière expérience (légende 6P+1B+1AO), on assimile à chaque temps d'observation, les 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure de concentration en bore et 1 mesure de l'axial offset de puissance.	159
6.20	Incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus par assimilation de 4 séries d'observation. Trois expériences d'assimilation sont réalisées avec 3 ensembles de mesures. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures. L'erreur d'ébauche mise dans la matrice B est d'environ 5%.	160
6.21	Incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus par assimilation de 13 séries d'observation. 3 expériences d'assimilation sont réalisées avec 3 ensembles de mesures. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures. L'erreur d'ébauche mise dans la matrice B est d'environ 5%.	161
6.22	Incréments d'analyse de xénon et d'iode obtenus par assimilation de 25 séries d'observation. 3 expériences d'assimilation sont réalisées avec 3 ensembles de mesures. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 6 heures. L'erreur d'ébauche mise dans la matrice B est d'environ 2%.	161
6.23	Incréments d'analyse de xénon et d'iode pour une assimilation 4DVAR de 4×8 mesures (6 mesures de puissance, 1 mesure d'axial offset et 1 mesure de concentration en bore pour 4 temps d'observation) <i>sans</i> terme d'ébauche. Dans le premier cas, les mesures sont exactes ($\sigma_R = 0\%$). Dans le second cas, les mesures comportent 0.5% d'erreur ($\sigma_R = 0.5\%$). Dans le troisième cas, les mesures comportent 30% d'erreur pour les puissances, 10% pour l'axial offset et 1% pour la concentration en bore ($\sigma_R = 30\%, 10\%, 1\%$).	163
6.24	Évolution sur l'ensemble des composantes du vecteur concentration xénon, d'une perturbation sur la 5ème composante du vecteur concentration xénon au temps initial, après 12 heures de simulation : la perturbation s'est considérablement réduite au niveau de la 5ème composante en même temps qu'elle s'est propagée aux autres composantes.	163
6.25	Écart entre l'analyse et l'ébauche $\ \mathbf{X}^a - \mathbf{X}^b\ ^2$ à t_0 en fonction de l'échelle de corrélation. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8×8 mesures (8 temps d'observation) sont assimilées.	164
6.26	Nombre d'itérations nécessaires pour la convergence de l'algorithme de minimisation en fonction de l'échelle de corrélation L . La minimisation est réalisée avec l'algorithme BFGS avec un critère d'arrêt de 10^{-4} sur la norme du gradient. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8×8 mesures (8 temps d'observation) sont assimilées à l'aide d'un schéma 4DVAR.	165
6.27	Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps initial t_0 en fonction de l'échelle de corrélation L retenue pour la construction de la matrice \mathbf{B} . La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8×8 mesures (8 temps d'observation) sont assimilées.	166
6.28	Moyenne et écart-type des erreurs spatiales sur le xénon et l'iode au temps initial, en fonction de l'échelle de corrélation L retenue pour la construction de la matrice \mathbf{B} . La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 8×8 mesures (8 temps d'observation) sont assimilées.	167

6.29	Rapport $tr(\mathbf{P}^a)/tr(\mathbf{B})$ en fonction du nombre de séries d'observation et pour différents écarts-types σ_B ayant servi à la construction de la matrice \mathbf{B} . Le transitoire calculé par le modèle \mathcal{M} est décrit en 6.1.3. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 18 heures et la fréquence des observations est au maximum de 3 heures. .	168
7.1	Profil 1D d'irradiation utilisé pour l'expérience (réacteur en milieu de vie). Ce profil tient compte des grilles de maintien du combustible.	174
7.2	Simulation avec CIREP1D du transitoire de référence. Les pas de temps sont de 30 secondes entre l'instant initial et la 2010ème seconde ; ils sont de 120 secondes entre $t = 2010$ et $t = 2250$ secondes, de 250 secondes entre $t = 2250$ et $t = 78780$ secondes puis de 900 secondes jusqu'à la fin de la simulation.	174
7.3	Simulation avec CIREP1D du transitoire d'ébauche. Les pas de temps sont identiques à ceux du transitoire de référence.	174
7.4	Axial offset de xénon au cours du temps. Dans le cas du transitoire ébauche, les oscillations sont de plus grande amplitude mais semblent être de même fréquence que celles du transitoire de référence.	175
7.5	Évolution de la concentration en bore nécessaire pour rendre critique le cœur. Au moment de la reprise des données exactes du KIT, on observe un saut dans la concentration en bore pour le transitoire ébauche.	175
7.6	Écarts relatifs $100 \times \frac{\mathbf{X}^{ref}(i) - \mathbf{X}^b(i)}{\mathbf{X}^{ref}(i)}$ dans chaque maille i sur les concentrations xénon et iode à $t = 40$ heures.	176
7.7	Écart $\ C_{Xe}^{ref} - C_{Xe}^b\ _2$ en norme euclidienne entre la concentration xénon calculée dans le cadre de référence C_{Xe}^{ref} et celle calculée dans le cadre ébauche C_{Xe}^b . Dans cette simulation, l'écart s'amplifie jusqu'au 9ème jour pour ensuite rediminuer. .	177
7.8	Profil 1D de puissance calculé à partir de l'incrément d'analyse de xénon. On donne pour comparaison les profils 1D de puissance de référence et d'ébauche. L'incrément d'analyse de xénon est obtenu avec un schéma 3DVAR avec assimilation au temps initial t_0 de 6 mesures de puissance intégrée axialement, 1 mesure d'axial offset de puissance et 1 mesure de concentration en bore critique.	179
7.9	Axial offset de puissance et des concentrations en bore critique pour l'état de référence, l'ébauche et l'état analysé. L'analyse est obtenue avec un schéma 3DVAR avec assimilation au temps initial t_0 de 6 mesures de puissance intégrée axialement, 1 mesure d'axial offset de puissance et 1 mesure de concentration en bore.	180
7.10	Au temps t_0 , incrément vrai et incrément d'analyse de xénon obtenu avec le schéma 3DVAR où sont assimilés au temps t_0 6 mesures de puissance intégrée, 1 mesure d'axial offset de puissance et 1 mesure de concentration en bore.	181
7.11	Profil 1D de puissance prédit à $t_0 + 6$ heures après réajustement de la concentration initiale de xénon à l'aide du schéma 3DVAR.	182
7.12	Axial offset de puissance prédit par les schémas 3DVAR et 4DVAR comparés à l'axial offset de référence. L'axial offset prédit à l'aide du schéma 4DVAR correspond dans cette figure à l'assimilation d'observations aux temps t_0 et $t_0 + 6h$. . .	182
7.13	Profil 1D de puissance prédit à $t_0 + 6$ heures après réajustement de la concentration initiale de xénon à l'aide du schéma 4DVAR (fenêtre de 6 heures et 2 temps d'observation).	183
7.14	Incrément vrai et incrément d'analyse de xénon au temps initial t_0 obtenus d'une part avec le schéma 3DVAR et d'autre part avec le schéma 4DVAR et où les deux temps d'observation sont séparés de 6 heures.	184

7.15	Erreur relative calculée en norme euclidienne sur le profil 1D de puissance calculé après réajustement de la concentration initiale de xénon à l'aide d'un schéma 3DVAR et deux schémas 4DVAR. Les schémas 4DVAR sont basés sur une fenêtre de 3 heures (délimitée par une barre verticale dans la figure) et on a étudié un premier cas avec 2 temps d'observation et un second cas avec 4 temps d'observation. On peut comparer ces résultats avec ceux des schémas 4DVAR où le xénon et l'iode sont contrôlés et pour lesquels on observe une réduction de l'erreur par exemple de 3% à la trentième heure (figure 7.21).	184
7.16	Incrément vrai et incréments d'analyse de xénon au temps initial t_0 obtenus d'une part avec le schéma 3DVAR et d'autre part avec deux schémas 4DVAR avec respectivement 2 et 4 temps d'observation. La taille de la fenêtre des schémas 4DVAR est de 3 heures.	185
7.17	Incréments d'analyse de xénon et d'iode en 4DVAR. La fenêtre d'assimilation est de 15 minutes. A t_0 et à $t_0 + 15$ minutes, on observe 6 mesures de puissance intégrée, une mesure d'axial offset de puissance et une mesure de concentration en bore.	186
7.18	Erreur en norme euclidienne sur le champ 1D de puissance au cours du temps avec ou sans contrôle de l'iode. Le schéma d'assimilation est un schéma 4DVAR où la taille de la fenêtre d'assimilation est de 15 minutes.	187
7.19	Incréments d'analyse de xénon et d'iode selon la taille de la fenêtre d'assimilation. Le schéma d'assimilation est un schéma 4DVAR comportant deux séries de mesures (au début et à la fin de la fenêtre).	187
7.20	Incréments d'analyse de xénon et d'iode selon le nombre d'observations assimilées. Le schéma d'assimilation est un schéma 4DVAR où la taille de la fenêtre d'assimilation est de 6 heures.	188
7.21	Erreur en norme euclidienne sur le champ 1D de puissance au cours du temps avec ou sans contrôle de l'iode. Le schéma d'assimilation est un schéma 4DVAR où la taille de la fenêtre d'assimilation est de 6 heures.	189
7.22	Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 . La fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 4 séries de mesure sont assimilées. Le cas 1 correspond à une matrice \mathbf{B} construite à partir des écarts-types suivants : $\sigma_{Bxe} = 3\%$ pour le xénon et $\sigma_{Bi} = 2\%$ pour l'iode. Les écarts-types du cas 2 sont $\sigma_{Bxe} = 7\%$ et $\sigma_{Bi} = 4\%$. Et enfin les écarts-types σ_B du cas 3 sont fixés à 30%.	190
7.23	Axial offset de puissance de référence et d'analyse calculés avec les écarts-types $\sigma_{Bxe} = 3\%$ et $\sigma_{Bi} = 2\%$ (cas 1) et $\sigma_B = 30\%$ (cas 2). La fenêtre d'assimilation est de 3 heures et 4 séries de mesure sont assimilées.	190
8.1	Nappes axiales d'irradiation en MWj/t utilisées comme donnée d'entrée de CIREP1D. La nappe de référence correspond à un combustible légèrement moins irradié dans les premières et dernières mailles du maillage du cœur actif. Les variations d'irradiation liées à la présence des grilles de maintien du combustible sont également un peu moins fortes pour le modèle de référence.	195
8.2	Simulation avec CIREP1D du transitoire de référence. Les consignes de puissance et d'insertion des grappes sont données dans le tableau 8.1.	195
8.3	Axial offset de puissance au cours du temps. Les variations de l'axial offset ont des amplitudes différentes mais partagent la même fréquence qui est dictée par la consigne d'insertion des grappes.	196

8.4	Évolution sur 24 heures des erreurs relatives des concentrations d'ébauche de xénon et d'iode. Dans le premier cas le modèle utilisé pour le calcul ébauche de la dynamique xénon/iode est le même modèle que celui utilisé pour le calcul de référence. Dans le second cas, un changement de la nappe 1D d'irradiation permet d'avoir un modèle imparfait. Les deux modèles sont initialisés en t_0 par les mêmes concentrations de xénon et d'iode. Dans le cas du modèle imparfait, l'erreur d'ébauche tend à augmenter au cours du temps alors que dans le cas du modèle parfait, elle tend à se résorber.	197
8.5	Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 pour différentes tailles de fenêtre d'assimilation. Les expériences sont conduites avec un modèle parfait. La matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} est construite à partir d'un écart-type $\sigma=5\%$ et la matrice des covariance d'erreur d'observation est construite à partir des écarts-types des erreurs d'observation rappelés en début de ce chapitre. La fréquence des observations est de 1 heure.	199
8.6	Axial offset de puissance de référence et d'analyse pour des fenêtres de taille 1 heure, 3 heures et 4 heures.	199
8.7	Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 avec modèle parfait. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et on assimile 4×8 mesures.	201
8.8	Incréments d'analyse de xénon et d'iode au temps t_0 avec modèle imparfait. La taille de la fenêtre d'assimilation est de 3 heures et on assimile 4×8 mesures.	201
8.9	Principe du chaînage de 8 expériences d'assimilation 4DVAR sur une période totale de 24 heures. Le modèle servant à propager le vecteur d'état entre deux analyses est le modèle utilisant la nappe 1D d'irradiation approchée de la figure 8.1.	202
8.10	Incréments de puissance vrai et d'analyse 4DVAR (avec modèle parfait) calculés sur une période de 24 heures et exprimés en MW. Dans chaque figure, l'axe des ordonnées correspond à la cote axiale donnée en mètres ; l'axe des abscisses correspond à la valeur de l'incrément de puissance. La courbe en trait plein correspond à l'incrément de référence et la courbe en pointillé l'incrément d'analyse.	203
8.11	Incréments de puissance vrai et d'analyse 4DVAR (avec modèle imparfait) calculés sur une période de 24 heures et exprimés en MW. Dans chaque figure, l'axe des ordonnées correspond à la cote axiale donnée en mètres ; l'axe des abscisses correspond à la valeur de l'incrément de puissance. La courbe en trait plein correspond à l'incrément de référence et la courbe en pointillé l'incrément d'analyse.	204
8.12	Axial offset de puissance analysé dans le cadre de l'expérience 4DVAR avec modèle imparfait . Les traits verticaux délimitent les fenêtres d'assimilation utilisées (ici 8 fenêtres pour une expérience de 24 heures).	205
8.13	Concentration en bore analysée dans le cadre de l'expérience 4DVAR avec modèle imparfait . Les traits verticaux délimitent les fenêtres d'assimilation utilisées (ici 8 fenêtres pour une expérience de 24 heures).	205
8.14	Incréments d'analyse de xénon obtenus avec un schéma 3DVAR et un modèle parfait. Dans un cas la minimisation s'effectue dans l'espace du vecteur d'état (\mathbb{R}^{60}) et dans l'autre dans un espace réduit (\mathbb{R}^{16})	207
8.15	Incréments d'analyse de xénon et d'iode calculés avec les schémas 4DVAR M60 (minimisation dans \mathbb{R}^{60}) et M16 (minimisation dans \mathbb{R}^{16}). La taille de la fenêtre est de 1 heure et 2 séries d'observation sont assimilées (soit 2×8 mesures). Le modèle est parfait.	208

8.16	Incréments d'analyse de xénon et d'iode calculés avec les schémas 4DVAR M60 (minimisation dans \mathbb{R}^{60}) et M16 (minimisation dans \mathbb{R}^{16}). La taille de la fenêtre est de 3 heures et 4 séries d'observations sont assimilées (soit 4×8 mesures). Le modèle est parfait.	209
8.17	Principe du chaînage de 25 expériences d'assimilation 3DVAR sur une période totale de 24 heures. Le modèle servant à propager le vecteur d'état entre deux analyses est le modèle utilisant la nappe 1D d'irradiation approchée de la figure 8.1 (modèle parfait).	209
8.18	Incréments de puissance vrai et d'analyse 3DVAR (avec modèle parfait calculés sur une période de 24 heures et exprimés en MW. Dans chaque figure, l'axe des ordonnées correspond à la cote axiale donnée en mètres ; l'axe des abscisses correspond à la valeur de l'incrément de puissance. La courbe en trait plein correspond à l'incrément de référence et la courbe en pointillé l'incrément d'analyse.	210
8.19	Incréments de puissance vrai et d'analyse 3DVAR. L'expérience d'assimilation est la même que celle de la figure 8.18. Seules les observations ont changé (on a introduit un autre bruit dans les mesures). Dans chaque figure, l'axe des ordonnées correspond à la cote axiale donnée en mètres ; l'axe des abscisses correspond à la valeur de l'incrément de puissance. La courbe en trait plein correspond à l'incrément de référence et la courbe en pointillé l'incrément d'analyse.	211
A.1	Dynamique des axial offsets normalisés de flux, xénon et iode sur une période d'environ 1 semaine.	226

Glossaire de Neutronique

d'après [Cea01] et [Ker01]

activité : nombre de désintégrations par unité de temps au sein par exemple du combustible ; exprimée en becquerel (Bq) qui correspond à une désintégration par seconde.

axial offset : (de puissance) répartition de la puissance entre le haut et le bas du cœur du réacteur.

bilan neutronique : résultante des productions et des disparitions de neutrons en réacteur.

bore : poison neutronique utilisé sous forme dilué dans l'eau du circuit primaire. Sa concentration est mesurée en ppm (parties par million). Son retrait progressif au cours du cycle permet de compenser l'usure du combustible.

calcul dynamique : pour les codes de neutronique, fait référence à un calcul à une irradiation donnée et intégrant une dynamique xénon. Constantes de temps des phénomènes : la dizaine de minutes. Modélisation généralement retenue pour les calculs de pilotage.

calcul statique : pour les codes de neutronique, fait référence à un calcul à une irradiation donnée sans dynamique xénon et sans cinétique neutronique.

campagne : période comprise entre le redémarrage du réacteur après le renouvellement partiel du combustible, et l'arrêt du réacteur lié au renouvellement partiel suivant.

critique : le cœur est dit critique lorsque le nombre de neutrons émis par fission est égal au nombre de neutrons disparaissant par absorption et par fuite (bilan neutronique nul). Dans ce cas, le nombre de fissions observé pendant des intervalles de temps successifs reste constant.

cycle naturel : fait référence à la partie d'une campagne s'effectuant à puissance nominale par dilution du bore soluble.

désintégration : transformation d'un noyau instable en un autre noyau qui peut être stable ou instable.

empoisonnement du combustible : phénomène de capture de neutrons par certains produits de fission qui s'accumulent au cours de l'irradiation (xénon 135, samarium 149 par exemple), dégradant ainsi le bilan neutronique.

iode 135 : produit de fission à l'état de gaz aux températures régnant dans le cœur.

nappe de puissance : répartition de la puissance dégagée par un réacteur en ses différents points. La nappe peut être 1D, 2D ou 3D en fonction de la géométrie modélisée par le code de neutronique qui calcule cette nappe.

période : durée au bout de laquelle la moitié des atomes radioactifs d'une espèce initialement présents a disparu en se désintégrant naturellement. La période du tellure est de quelques secondes alors que celle du xénon 135 est de plusieurs heures.

poisons : éléments dotés d'un fort pouvoir de capture des neutrons. Les produits de fission peuvent être des poisons neutroniques (cas du xénon par exemple). Certains poisons sont introduits volontairement dans le cœur pour compenser un excédent de réactivité comme le bore dissout dans l'eau du circuit primaire ou les poisons consommables qui disparaissent progressivement au cours du cycle.

produits de fission : noyaux générés soit directement par la fission nucléaire, soit indirectement par la désintégration des fragments de fission.

Réacteur à Eau sous Pression (REP) : réacteur dans lequel la chaleur produite dans le cœur est transférée à l'eau du circuit primaire qui traverse le cœur. Le circuit primaire est sous une pression suffisamment élevée pour éviter l'ébullition de l'eau.

réaction en chaîne : suite de fissions nucléaires au cours desquelles les neutrons libérés provoquent de nouvelles fissions, à leur tour génératrices de nouveaux neutrons provoquant de nouvelles fissions et ainsi de suite.

taux de combustion : s'exprime en mégawatts-jour par tonne (MWj/t) et désigne la quantité d'énergie thermique par unité de masse de matière fissile obtenue en réacteur depuis le début d'une campagne.

transitoire : évolution lente ou rapide, programmée ou fortuite, de l'état d'un réacteur nucléaire. On distingue les transitoires normaux, lors desquels les valeurs des paramètres physiques restent à l'intérieur des spécifications techniques d'exploitation et les transitoires accidentels qui entraînent l'action de systèmes de protection puis de sauvegarde.

xénon 135 : gaz qui apparaît comme produit direct de la fission de l'uranium 235 dans une proportion de 0.1% et par désintégration beta de l'iode 135 dans une proportion de 6.4%. Le xénon 135 est l'un des principaux contributeurs à l'empoisonnement du cœur et est connu pour être à l'origine d'oscillations axiales de puissance.

Glossaire d'Assimilation de Données

3DVAR méthode d'assimilation variationnelle sans prise en compte de la dimension temporelle
4DVAR méthode d'assimilation variationnelle avec prise en compte de la dimension temporelle
3DFGAT (First Guess at Appropriate Time) méthode d'assimilation variationnelle intermédiaire entre le 3DVAR et le 4DVAR
BLUE Best Linear Unbiased Estimator
IO Interpolation Optimale

\mathcal{H} opérateur d'observation
 \mathbf{H} application linéaire tangente à \mathcal{H}
 $\mathcal{M}_{i,0}$ modèle dynamique entre les instants t_0 et t_i
 $\mathbf{M}_{i,0}$ application linéaire tangente à \mathcal{M}

\mathbf{X} vecteur d'état du modèle de dimension n
 $\delta\mathbf{X}$ incrément sur le vecteur d'état
 \mathbf{X}^t vecteur d'état vrai de dimension n (indice t pour *true*)
 \mathbf{X}^b vecteur d'ébauche de dimension n (indice b pour *background*)
 \mathbf{X}^a vecteur d'analyse de dimension n
 \mathbf{Y}_i^{obs} vecteur d'observation au temps i de dimension p

ϵ^b erreur d'ébauche ($X^b - X^t$)
 ϵ^{obs} erreur d'observation ($Y_i^{obs} - \mathcal{H}(X(t_i))$)
 ϵ^a erreur d'analyse ($X^a - X^t$)

\mathbf{B} matrice de covariance d'erreur d'ébauche
 \mathbf{R} matrice de covariance d'erreur d'observation
 \mathbf{A} matrice de covariance d'erreur d'analyse
 \mathbf{A} matrice de covariance d'erreur du modèle
 \mathbf{P}^f matrice de covariance d'erreur de prévision, *forecast* en anglais, (approche filtre)
 \mathbf{P}^a matrice de covariance d'erreur d'analyse (approche filtre)

\mathbf{K} matrice de gain
 \mathbf{L} opérateur linéaire dans la formulation du BLUE

\mathcal{J} fonction coût
 \mathcal{J}^b partie de la fonction coût liée à l'ébauche
 \mathcal{J}^{obs} partie de la fonction coût liée aux observations

Bibliographie

- [Bar93] BARJON R. *Physique des réacteurs nucléaires*. Institut des Sciences Nucléaires, 1993.
- [Boc05] BOCQUET M. *Introduction aux principes et méthodes de l'assimilation de données en géophysique*. Notes de cours de l'École Nationale Supérieure des Techniques Avancées, 2005.
- [Bon97] BONNANS J.F., GILBERT J.C., LEMARÉCHAL C. ET SAGASTIZÁBAL C. *Optimisation Numérique : Aspects théoriques et pratiques*, tome 27 de *Mathématiques et Applications*. Springer-Verlag, 1997.
- [Bou99] BOUTTIER F. ET COURTIER P. *Data assimilation concepts and methods*. Dans *ECMWF Lecture note*. 1999.
- [Bro70] BROYDEN C. *The convergence of a class of double-rank minimization algorithms. II. the new algorithm*. *Journal of the Institute of Mathematics and Its Applications*, 6(3) :222 – 31, 1970.
- [Bui06] BUIS S., PIACENTINI A. ET DÉCLAT D. *PALM : a computational framework for assembling high-performance computing applications*. *Concurrency and Computation Practice and Experience*, 18(2) :231 – 45, 2006.
- [Bus85] BUSSAC J. ET REUSS P. *Traité de neutronique : Physique et calcul des réacteurs nucléaires avec application aux réacteurs à eau pressurisée et aux réacteurs à neutrons rapides*. Hermann, 1985.
- [Cam06] CAMPILLO F. *Filtrage particulière et modèles de markov cachés*. 2006.
- [Can66] CANOSA J. ET BROOKS H. *Xenon-induced oscillations*. *Nuclear Science and Engineering*, 26 :237–253, 1966.
- [Cea01] *CLEFS CEA : Physique nucléaire et Sécurité*. 2001. Numéro 45.
- [Cho83] CHO N.Z. ET GROSSMAN L. *Optimal control for xenon spatial oscillations in load follow of a nuclear reactor*. *Nuclear Science and Engineering*, 83(1) :136 – 48, 1983.
- [Cho94] CHOI Y.C., PARK G.C. ET CHUNG C.H. *Xenon stability analysis using the generalized nyquist criterion*. *Nuclear Technology*, 106(3) :292 – 299, 1994.
- [Coh98] COHN S., TODLING R. ET SIVAKUMARAN N. *Suboptimal schemes for retrospective data assimilation based on the fixed-lag kalman smoother*. *Monthly Weather Review*, 126(8) :2274 – 2826, 1998.
- [Con92] CONN A., GOULD N. ET TOINT P. *Lancelot : A Fortran Package for Large-scale Nonlinear Optimization (release A)*, tome 17. Springer, 1992.
- [Cou87] COURTIER P. ET TALAGRAND O. *Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. II : Numerical results*. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 113(478) :1329–1347, 1987.

- [Cou94] COURTIER P., THÉPAUT J.N. ET HOLLINGSWORTH A. *A strategy for operational implementation of 4D-Var, using an incremental approach. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 120 :1367–1388, 1994.
- [Dal91] DALEY R. *Atmospheric Data Analysis*. Cambridge University Press, 1991.
- [Del94] DELMAIRE P. ET OUADAH M. *Dossier d'analyse de l'application KIT*. Rapport technique HP-32/94/017/A, EDF R&D, 1994.
- [Dom03] DOMINGOS R., CALDAS G., PEREIRA C. ET SCHIRRU R. *PWR's xenon oscillation control through a fuzzy expert system automatically designed by means of genetic programming. Applied Soft Computing Journal*, 3(4) :317 – 323, 2003.
- [Erh05] ERHARD P., GACON G., BUIS S. ET MASSART S. *MANARA : maquette d'assimilation de nappes 3D d'activités avec le modèle de diffusion COCCINELLE, implémentée sur la plateforme PALM*. Rapport technique HI-23/05/006/A, EDF R&D and CER-FACS, 2005.
- [Erh06] ERHARD P., GACON G. ET MASSART S. *Estimation optimale des paramètres de qualification de COCCINELLE avec KAFEINE*. Rapport technique HI-I23-2006-00685-FR, EDF R&D, 2006. Accès restreint.
- [Eve94] EVENSEN G. *Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using monte carlo methods to forecast error statistics. Journal of Geophysical Research*, 99(C5) :10143 – 62, 1994.
- [Eve03] EVENSEN G. *The Ensemble Kalman Filter : theoretical formulation and practical implementation. Ocean Dynamics*, 53(4) :343–367, 2003.
- [Fau98] FAURE C. ET PAPEGAY. *ODYSSÉE User's guide. Version 1.7*. Rapport de Recherche RT-0224, INRIA, Sophia-Antipolis, 1998.
- [Fio00] FIORONI J. *Code LIBELLULE - Version 4.0 - Note de principe*. Rapport technique E-N-T-PN/00-00001, EDF SEPTEN, 2000.
- [Fio01] FIORONI J. *Code LIBELLULE - Version 4.0 - Note de Validation*. Rapport technique E-N-T-PN/01-00322, EDF SEPTEN, 2001.
- [Fis98] FISHER M. *Minimization algorithms for variational data assimilation*. Dans *Seminar on "recent developments in numerical methods for atmospheric modelling*, pages 364–385. ECMWF, Reading, 1998.
- [Fis01] FISHER M. ET ANDERSSON E. *Developments in 4D-Var and Kalman filtering*. technical memorandum 347, ECMWF, 2001.
- [Fle64] FLETCHER R. ET REEVES C. *Function minimization by conjugate gradients. Computer Journal*, 7 :149–154, 1964.
- [Fle70] FLETCHER R. *New approach to variable metric algorithms*. 13(3) :317 – 22, 1970.
- [Gan63] GANDIN L. *Objective Analysis of Meteorological Fields*. IPST, 1963.
- [Gas99] GASPARI G. ET COHN S. *Construction of correlation functions in two and three dimensions. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 125(554) :723 – 57, 1999.
- [Ghi82] GHIL M., MURRAY W. ET WRIGHT M. *Practical optimization*. Academic Press, London, 1982.
- [Gie97] GIERING R. *Tangent linear and Adjoint Model Compiler, Users manual*. Rapport technique, Users manual Max-Planck Institute, 1997.

-
- [Gie98] GIERING R. ET KAMINSKI T. *Recipes for adjoint code construction*. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 24(4) :437 – 74, 1998.
- [Gil90] GILBERT J. ET NOCEDAL J. *Global convergence properties of conjugate gradient methods for optimization*. Rapport de Recherche 1268, INRIA, 1990.
- [Gil91] GILBERT J.C., LE VEY G. ET MASSE J. *La différentiation automatique de fonctions représentées par des programmes*. Rapport de Recherche RR-1557, INRIA, 1991.
- [Gri96] GRIEWANK A., JUEDES D. ET UTKE J. *Algorithm 755 : ADOL-C : a package for the automatic differentiation of algorithms written in C/C++*. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 22(2) :131 – 67, 1996.
- [Ker01] KERKAR N. ET PETIT A. *Notes techniques : cours de génie atomique*. Rapport technique, EDF, 2001.
- [Kob82] KOBAYASHI K. ET YOSHIKUNI M. *Analysis of xenon oscillation by coupled reactor model*. 19(2) :107 – 118, 1982. XENON ;.
- [Lag01] LAGARDE T., PIACENTINI A. ET THUAL O. *A new representation of data-assimilation methods : the PALM flow-charting approach*. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 127 :189–207, 2001.
- [LD86] LE DIMET F. ET TALAGRAND O. *Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : theoretical aspects*. *Tellus. Series A, Dynamic meteorology and oceanography*, 38(2) :97–110, 1986.
- [Lec01] LECARPENTIER D. ET CARPENTIER V. *Cinsf1d, un programme d'étude des réacteurs à combustible mobile en situation critique ou hors d'équilibre. Hypothèses physiques, résolution numérique et note informatique*. Rapport technique HT-13/01/037/A, EDF R&D, 2001. Accès restreint.
- [Leg06] LEGLAND F. *Filtrage bayésien et approximation particulière*. École d'Été d'Analyse Numérique CEA-EDF-INRIA - Assimilation de Données pour le Calcul Scientifique, 2006.
- [Lin94] LIN C. ET LIN Y. *Control of spatial xenon oscillations in pressurized water reactors via the kalman filter*. *Nuclear Science and Engineering*, 118(4) :260 – 267, 1994.
- [Liu89] LIU D. ET NOCEDAL J. *On the limited memory bfgs method for large scale optimization*. *Mathematical Programming, Series B*, 45(3) :503 – 528, 1989.
- [Lor81] LORENC A. *A global three-dimensional multivariate statistical interpolation scheme*. *Monthly Weather Review*, 109 :701–721, 1981.
- [Mar03] MARSEGUERRA M., ZIO E. ET TORRI G. *Power density axial oscillations induced by xenon dynamics : Parameter identification via genetic algorithms*. *Progress in Nuclear Energy*, 43(1-4 SPEC) :365 – 372, 2003.
- [Mas07] MASSART S., BUIS S., ERHARD P. ET GACON G. *Use of 3D-VAR and Kalman Filter approches for neutronic state and parameter estimation in nuclear reactors*. *Nuclear Science and Engineering*, 155 :409–424, 2007.
- [May79] MAYBECK P.S. *Stochastic models, estimation, and control*, tome 141 de *Mathematics in Science and Engineering*. 1979.
- [Mor94] MORE J. ET THUENTE D. *Line search algorithms with guaranteed sufficient decrease*. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 20(3) :286 – 307, 1994.
- [Noc99] NOCEDAL J. ET WRIGHT S.J. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, 2 édition, 1999.

- [One78] ONEGA R.J. ET KISNER R.A. *Axial xenon oscillation model. Annals of Nuclear Energy*, 5(1) :13 – 19, 1978.
- [One79] ONEGA R. ET KISNER R. *Parameter identification for spatial xenon transient analysis and control. Annals of Nuclear Energy*, 6(7-8) :369 – 74, 1979.
- [Ope] OPENAD. <http://www.mcs.anl.gov/openad>.
- [Par92] PARK Y. ET CHO N. *Estimation of neutron flux and xenon distributions via observer-based control theory. Nuclear Science and Engineering*, 111 :66–81, 1992.
- [Pei04] PEISEY F. ET RICHARD B. *Projet QALI : Analyse de la qualité des données KIT et apports des techniques de Traitement du Signal*. Rapport technique HP-14/04/044/A, EDF R&D, 2004.
- [Pet03] PETIT G., GARCIA E. ET ACKERMANN HEIB C. *COCCINELLE V3.5 : Note de principe des modèles physiques et des méthodes numériques*. Rapport technique HI-27/03/035/A, EDF R&D, 2003.
- [Pol69] POLAK E. ET RIBIÈRE G. *Note on the convergence of methods of conjugate directions. Revue Francaise d'Informatique et de Recherche Operationnelle*, 3(16) :35 – 43, 1969.
- [Rab96] RABIER F., THÉPAUT J.N. ET COURTIER P. *Four-dimensional variational assimilation at ecmwf*. Dans *ECMWF Seminar on data assimilation*. Reading, 1996.
- [Reu94] REUSS P. *L'énergie nucléaire*, tome 317 de *Que sais-je ?* Presses Universitaires de France, 1994.
- [Reu98] REUSS P. *La neutronique*, tome 3307 de *Que sais-je ?* Presses Universitaires de France, 1998.
- [Reu03] REUSS P. *Précis de Neutronique*. EDP Sciences, 2003.
- [Rou07a] ROUMANET F. *Application de Simulation Neutronique 1D SimuN1D*. Rapport technique D4550.37-07/4882, EDF, 2007. Accès restreint.
- [Rou07b] ROUMANET F. *Mise en place du REX des simulations de pilotage*. Rapport technique, EDF, 2007. Accès restreint.
- [Roz92] ROZON D. *Introduction à la cinétique des réacteurs nucléaires*. Éditions de l'École Polytechnique de Montreal, 1992.
- [Shi07] SHIMAZU Y. ET TAKEDA K. *Monitoring and control of radial xenon oscillation in pwr's by a three-radial-offset concept. Journal of Nuclear Science and Technology*, 44(2) :155 – 162, 2007.
- [Son96] SONG J.S., CHO N.Z. ET BYUNG H.L. *Analytic initialization of nonequilibrium iodine and xenon distributions for core transient simulation. Nuclear Technology*, 116(2) :137–145, 1996.
- [Son97] SONG J.S. ET CHO N.Z. *Two-group, flux-coupled xenon oscillation model with an equation system of axial difference parameters. Nuclear Technology*, 119(2) :105 – 111, 1997.
- [Sor70] SORENSON H.W. *Least-squares estimation : from gauss to kalman. IEEE Spectrum*, 7 :63–68, 1970.
- [Spo04] SPORTISSE B. ET QUÉLO D. *Assimilation de données. 1ère Partie : Éléments théoriques*. Rapport technique, Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique, 2004.

-
- [Tal87] TALAGRAND O. ET COURTIER P. *Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. I : Theory. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 113(478) :1311–1328, 1987.
- [Tal97] TALAGRAND O. *Assimilation of observations, an introduction. Journal of the Meteorological Society of Japan*, 75(1B) :191–209, 1997.
- [Tap04] INRIA. *TAPENADE 2.1 user's guide*, 2004.
- [Tod94] TODLING R. ET COHN S. *Suboptimal schemes for atmospheric data assimilation based on the kalman filter. Monthly Weather Review*, 122(11) :2530 – 57, 1994.
- [Tod99] TODLING R. *Estimation theory and foundations of atmospheric data assimilation. DAO Office Note*, 1 :1999, 1999.
- [Tré05] TRÉMOLET Y. *Model error estimation in 4D-Var. technical memorandum 469*, ECMWF, 2005.
- [Tré07] TRÉMOLET Y. *Model error estimation in 4D-Var. Technical Report 520*, ECMWF, 2007.
- [Utk06] UTKE J., NAUMANN U., FAGAN M., TALLENT N., STROUT M., HEIMBACH P., HILL C. ET WUNSCH C. *OpenAD/F : A modular, open-source tool for automatic differentiation of fortran codes. ACM TOMS*, 2006.
- [Yoo85] YOON M.H. ET NO H.C. *Direct numerical technique of mathematical programming for optimal control of xenon oscillation in load following operation. Nuclear Science and Engineering*, 90(2) :203 – 209, 1985.

Doctorat de l'Université de Toulouse
Délivré par l'Institut National Polytechnique de Toulouse
Ecole doctorale : MEGeP
Spécialité : Dynamique des fluides
Date de soutenance : 3 octobre 2008
Auteur : Angélique Ponçot
Directeur de thèse : Olivier Thual

Résumé

Le calcul de la dynamique xénon requiert un modèle physico-numérique alimenté par des données ou paramètres et des conditions initiales. Les sources d'erreur de ce calcul peuvent provenir à la fois du modèle ainsi que des données. Dans cette thèse, nous proposons d'améliorer la prévision de la dynamique xénon par le recalage de l'état initial de cette dynamique en utilisant toutes les informations disponibles (modèle numérique, estimation *a priori* de l'état initial et mesures) complétées par le niveau de confiance dans chacune de ces informations. La méthode utilisée est un schéma d'assimilation de données de type 4DVAR. Des expériences jumelles nous permettent d'estimer la qualité des concentrations initiales ainsi recalées. Les résultats rencontrés permettent d'envisager la mise en place d'un outil d'aide au pilotage continuellement réajusté grâce aux mesures in-situ.

Mots-clés : assimilation de données variationnelle, modélisation 1D des REP, dynamique xénon

Title: Data assimilation for xenon dynamics in nuclear plants

Abstract

Xenon-135 is a nuclear fission product which is known to be source of undesired roughly one day period density axial oscillations in pressurized water reactors. Xenon dynamics are non linearly coupled to another fission product the iodine-135. Such a coupling represents a challenge for the oscillation prediction. In order to improve xenon estimation, we investigate the feasibility of using variational data assimilation methods. The aim is to obtain a better estimation of initial 1D concentrations of xenon and iodine. Data assimilation techniques are widely used in meteorology and oceanography to improve initial states and forecasts. Such methods combine all kind of information about the system (model, a prior estimate of the true state and data). These information are weighted according to their accuracy expressed in error covariance matrices. The state resulting from the assimilation process is called analysis. 3DVAR and 4DVAR schemes for xenon dynamics are developed within the framework of twin experiments. This means that observations are obtained through numerical computation. Such a procedure allows an evaluation of produced analysis quality. The model developed for this purpose (CIREP1D) includes a monodimensional xenon dynamics linked to a monodimensional thermic and thermohydraulic model. Linear tangent and adjoint of this model are obtained through automatic differentiation. Observations are of three kinds : integrated powers over several nodes, power axial offset and boron concentration. This work figures out improvements on the estimation of iodine and xenon initial concentrations. Such encouraging results allow to set up tuning tool for an operator guiding system.

Key words: variational data assimilation, 1D modeling of a PWR, xenon dynamic

Intitulé et adresse du laboratoire :

CERFACS

42, avenue Gaspard Coriolis

31057 Toulouse Cedex 1